

ISSN 0253-2778

CODEN CKHPD7

# 中国科学技术大学学报

第 22 卷

第 3 期

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY  
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 22

No. 3

3

1992

# 中国科学技术大学学报

第 22 卷 第 3 期 (总第 78 期)

## 目 录

均值非零的多元正态分布函数矩形区域的概率质量单调性.....	胡太忠(265)
$O(^3p)$ 原子与乙醚和异丙醚化学反应速率常数的测定 .....	陈从香 周惠林 余枝广(271)
柱位形等离子体中气球模的相干结构.....	陈银华 朱栋培(277)
链霉菌 M1033 葡萄糖异构酶的分离纯化及其性质的研究 ..... 黄婉治 王 淳 刘 兢 崔 涛 刘咸安 牛立文 王玉珍 徐 洵(283)	
精密轴承钢球纳米级表面粗糙度的测量与评定 ..... 黄文浩 J. M. 郭美思 A. M. 巴 罗(290)	
三维形体消隐和相贯线的一种新算法.....	朱仁芝 大美花 邓益民(295)
关于西群上插值问题的一些讨论.....	郑学安(303)
内参型非协调元位移试解完备性的研究.....	焦兆平 吴长青 黄茂光(308)

## 研究简报

实二次函数域的一个结果.....	邢朝平(318)
聚乙二醇增强 Rh-6G 水溶液发光能力的机制研究 .....	李银妹 邓 杰(321)
植物叶绿体色素的纸色谱分离.....	赵贵文 崔 华 罗思泉 尹香莲(325)
用于扩展 X 射线吸收精细结构谱仪的多丝正比室的研究 ..... 田 杰 赵淑君 吴岳林 王燕霞(331)	
几种 MOCVD 用挥发性 $\beta$ -二酮类金属螯合物的合成及初步研究 ..... 曹传宝 彭定坤 杨萍华 孟广耀 张国赏(336)	
暴雨过程环境涡散场能量收支特征.....	汪钟兴(342)
PSD 激光测微仪的研制与精度分析.....	金泰义 李胜利 徐 育 郇 明(348)
用瞬态法对竖板夹层内自然对流换热的研究——双层玻璃窗最佳间距的确立 ..... 张寅平 陈则韶 葛新石(354)	
油池火蔓延过程的数值模拟.....	汪 箭 范维澄(361)
水泥结构裂缝检测系统.....	卢结成 戴英侠 庄镇泉(365)
自动限温加热带的起动态与过渡态参数的测量.....	周佩玲 彭 虎 吴耿锋 张汉昌(370)
广义 de Bruijn 图中 Euler 四路和 Hamilton 圈的计数 .....	胡龙妹(375)



# JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 22 No. 3 (Sum No. 78)

## CONTENTS

- Monotonicity of the Probability of a Rectangular Region Under a Multinormal Distribution  
With Nonzero Means ..... Hu Taizhong(265)
- The Measurements of Rate Constants for Reactions of  $O(^3p)$  Atoms With Ether and Isopropyl  
Ether Molecules ..... Chen Congxiang, Zhou Huilin, Yu Zhiguang(271)
- Coherent Constructure of the Ballooning Mode in Plasma Cylinder  
..... Chen Yinhua, Zhu Dongpei(277)
- Purification and Properties of D-Glucose Isomerase From Streptomyces M1033  
..... Huang Wanzhi, Wang Chun, Liu Jing, Cui Tao  
Liu Xian, Niu Liwen, Wang Yuzhen, Xu Xun(283)
- Surface Roughness Measuring and Evaluating at Nanometer Scale for Precise Bearing Ball  
..... Huang Wenhao, J. M. Gomez-Rodriguez, A. M. Baro(290)
- A New Algorithm for Removing Hidden Lines and Obtaining Intersections of 3-D Objects  
..... Zhu Renzhi, Tai Meihua, Deng Yimin(295)
- A Discussion on Interpolations on Unitary Groups ..... Zheng Xuean(303)
- A Study on the Completeness of Displacement Trial Function of Incompatible Elements With  
Internal Parameters ..... Jiao Zhaoping, Wu Changchun, Huang Maoguang(308)

### Research Notes

- A Result of Real Quadratic Function Fields ..... Xing Chaoping(318)
- Investigation on the Mechanism of Increasing Luminescent Yield of the Rh-6G Aqueous  
Solution by the Polyglycol Additives ..... Li Yinmei, Deng Jie(321)
- Paper-Chromatographic Separation of Plant Chloroplast Pigments  
..... Zhao Guiwen, Cui Hua, Luo Siqun, Yin Xianglian(325)
- The Development of the Multiwire Proportional Chamber for the Measurement of Extended of

X-ray Absorptions Fine Structure .....	Tian Jie, Zhao Shujun, Wu Yuelin, Wang Yianxia (331)
Synthesis and Preliminary Study of Several Volatile Metal Beta-Diktonone Chelates .....	Cao Chuanbao, Peng Dingkun, Yang Pinghua Meng Guangyao, Zhang Guoshang (336)
The Characteristics of Budget for Divergent and Rotational Components of Kinestic Energy in Heavy Rain Processes .....	Wang Zhongxing (342)
The Development of PSD Laser Measuring Micro-Displacement Instrument and Its Accuracy Analysis .....	Jin Taiyi, Li Shengli, Xu Yu, Li Ming (348)
Application of the Transient Method to the Investigation of Natural Convective Heat Transfer in Vertical Rectangular Enclosures —— The Determination of the Optimal Space Gap of Double-Glazing Window .....	Zhang Yinping, Chen Zeshao, Ge Xinshi (354)
Prediction of Flame Spreading of a Oil Pool .....	Wang Jian, Fan Weicheng (361)
Crack Testing System of Cement Structure .....	Lu Jiecheng, Dai Yingxia, Zhuang Zhenquan (365)
The Measurement of Parameters of Start State and Transitional State on the Self-Temperature-Limiting Heating Strips .....	Zhou Peiling, Peng Hu, Wu Gengfeng, Zhang Hanchang (370)
Enumeration of Euler Circuits and Hamilton Cycles in Generalized de Bruijn Digraphs .....	Hu Lungmei (375)
Fast Interpolating Between Cross-Sectional Contours .....	Wang Binquan, Luo Bin (385)

# Monotonicity of the Probability of a Rectangular Region Under a Multinormal Distribution With Nonzero Means

Hu Taizhong

(Department of Mathematics)

## Abstract

Let random vector  $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)'$  follow the distribution  $N_n(\Sigma\beta, \Sigma)$ , where  $\beta \in R^n$  and  $\Sigma = (\sigma_{ij})$ . If all elements of  $\beta$  are nonnegative or nonpositive, and if there exists a diagonal matrix  $D$  with diagonal elements  $\pm 1$  such that the off-diagonal elements of  $-D\Sigma^{-1}D$  are all nonnegative, then  $P[|X_i| < c_i, i = 1, \dots, n]$  is shown to be nondecreasing in  $|\sigma_{ij}|$ ,  $i \neq j$ , for every  $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)'$ . This generalizes the result of Bolviken and Joag-dev (1982).

**Key words:** monotonicity of probability, Slepian's lemma, multinormal distribution

**AMS Subject Classification (1991):** 60E15

## 1 Introduction and Results

The relation between the correlation coefficients and the probability assignment by multinormal distributions to certain regions was studied by Slepian<sup>[1]</sup>, Sidák<sup>[2]</sup>, Bolviken and Joag-dev<sup>[3]</sup>, among others.

Let  $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)' \sim N_n(\mu, \Sigma)$ , i. e.  $X$  has an  $n$ -variate normal distribution with mean vector  $\mu$  and covariance matrix  $\Sigma = (\sigma_{ij})$ . The earlier result in this area is due to Slepian<sup>[1]</sup> who states that for every vector  $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)'$  of constant, and  $1 \leq i \neq j \leq n$

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_{ij}} P[X_i \geq c_i, i = 1, \dots, n] \geq 0 \quad (1)$$

and

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_{ij}} P[X_i \leq c_i, i = 1, \dots, n] \geq 0 \tag{2}$$

Sidák<sup>[2]</sup> pointed out that the analogous results for the  $|X_i|$  as in (1) and (2) donot hold.

For simultaneous confidence intervals and testing hypotheses the region  $|X_i| \leq c_i, i = 1, \dots, n$  plays an important role, so it prompts the research for sufficient conditions on the mean vector  $\mu$  and the covariance matrix  $\Sigma$  such that the analogous results for the  $|X_i|$  as in (1) or (2) holds.

**Definition** An  $n \times n$  matrix  $T$  is called an  $M$ -matrix if it is of the form  $T = \lambda I_n - C$ , where  $C = (c_{ij})$ ,  $c_{ij} \geq 0$ , and  $\lambda > 0$  exceeds the absolute value of every characteristic root of  $C$ .

Specially, we know covariance matrix  $\Sigma = (\sigma_{ij})_{n \times n}$  is  $M$ -matrix iff  $\sigma_{ij} \leq 0$  for  $i \neq j$ .

Bolviken and Joag-dev<sup>[1]</sup> gave a sufficient condition for the case  $\mu = 0$ . That is Fact 1<sup>[1]</sup>: Let  $X \sim N_n(0, \Sigma)$ . Suppose that there exists a signature matrix  $D$ , i. e. a diagonal matrix  $D$  with diagonal elements  $\pm 1$ , such that  $D\Sigma^{-1}D$  is an  $M$ -matrix. Then  $P[|X_i| \leq c_i, i = 1, \dots, n]$  and  $P[|X_i| \geq c_i, i = 1, \dots, n]$  are nondecreasing in  $|\sigma_{ij}|, i \neq j$  and for every  $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)'$ .

We now state the main theorems which extend the above result to the case  $\mu \neq 0$ .

**Theorem 1** Let  $X \sim N_n(\Sigma\beta, \Sigma), \beta = (b_1, b_2, \dots, b_n)' \in R^n$ . Suppose that  $b_i \geq 0, i = 1, \dots, n$  (or  $b_i \leq 0, i = 1, \dots, n$ ), and that there exists a signature matrix  $D$  such that  $D\Sigma^{-1}D$  is  $M$ -matrix. Then

$$P[|X_i| \leq c_i, i = 1, \dots, n]$$

is nondecreasing in  $|\sigma_{ij}|, 1 \leq i \neq j \leq n$ , for every  $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)'$ .

**Theorem 2** Under the conditions of Theorem 1, consider the partitions

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}$$

where  $\beta_1 \in R^r$ , and  $\Sigma_{11}$  is  $r \times r$  submatrix,  $1 \leq r \leq n$ . If  $\beta_2 = 0$ , then

$$P[|X_i| \leq c_i, |X_j| \geq c_j, i = 1, \dots, r; j = r + 1, \dots, n]$$

is nonincreasing in  $|\sigma_{ij}|, 1 \leq i \leq r < j$ , for every  $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)'$ .

The proofs of Theorem 1 and 2, developed in section 2, relies on the result of Kelly and Sherman<sup>[4]</sup> pertaining to correlation inequalities for particle systems subject to interaction potentials.

## 2 The Heart of the Proof

Before proving the main results, we need some lemmas. We first introduce the Kelly—Sherman correlation inequalities in a formulation convenient for the main theorems.

Let  $\delta = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n)'$  be a random vector such that each  $\delta_i$  component assumes the possible values  $\pm 1$  governed by the joint probability density function (p. d. f. ).

$$p(\delta) = c \exp\left[ \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{ij} \delta_i \delta_j + \sum_{1 \leq i \leq n} b_i \delta_i \right] \tag{3}$$

where  $c$  is a normalizing constant and

$$a_{ij} \geq 0, b_i \geq 0, 1 \leq i < j \leq n, 1 \leq l \leq n \tag{4}$$

For any index set  $A \in \{1, 2, \dots, n\} \equiv N$ , define the function

$$f_A(\delta_1, \dots, \delta_n) = \prod_{i \in A} \delta_i$$

If  $A$  is a null set, we define  $f_A=1$ .

The above model is a special case of Kelly and Sherman<sup>[4]</sup>. Karlin and Rinott<sup>[5]</sup> consider the most special case that  $b_j=0, j=1, \dots, n$  in (4). Lemma 1 below follows from the main theorem in [4].

Lemma 1<sup>[4]</sup> In the model defined above. For any two index sets  $A, B \subseteq N$ , we have

$$E f_A f_B \geq E f_A E f_B$$

and

$$E f_A \geq 0 \tag{5}$$

Lemma 2 Let  $A_1, A_2, \dots, A_r$  be any subsets of  $N$ , and let  $a_1, a_2, \dots, a_r$  be any real number. Then

$$E \left\{ \exp \left[ \sum_{1 \leq i \leq r} |a_i| f_{A_i} \right] \right\} \geq E \left\{ \exp \left[ - \sum_{1 \leq i \leq r} |a_i| f_{A_i} \right] \right\} \tag{6}$$

and

$$E \left[ \sum_{1 \leq i \leq r} |a_i| f_{A_i} \right]^k \geq E \left[ \sum_{1 \leq i \leq r} a_i f_{A_i} \right]^k \tag{7}$$

for any integer  $k \geq 1$ .

Proof By Lemma 1, for any integers  $r_1, r_2, \dots, r_s$

$$E \left[ \prod_{i=1}^s \delta_i \right] \geq 0$$

Hence (7) is easily obtained by expanding the polynomials on both sides of (7), and for integer  $m \geq 1$

$$E \left[ \sum_{1 \leq i \leq r} |a_i| f_{A_i} \right]^m \geq 0$$

Thus, by expanding the exponential terms on the both sides of (6), we obtain

$$\begin{aligned} & E \left\{ \exp \left[ \sum_{1 \leq i \leq r} |a_i| f_{A_i} \right] \right\} - E \left\{ \exp \left[ - \sum_{1 \leq i \leq r} |a_i| f_{A_i} \right] \right\} \\ &= 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m)!} E \left[ \sum_{1 \leq i \leq r} |a_i| f_{A_i} \right]^{2m} \geq 0 \end{aligned}$$

The proof of Lemma 2 is complete.

Lemma 3 Let  $X \sim N_n(\Sigma\beta, \Sigma), \Sigma = (\sigma_{ij}), \beta = (b_1, b_2, \dots, b_n)'$ , and let  $f$  be p. d. f. of  $X$ . Then

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + b_i \frac{\partial f}{\partial x_j} + b_j \frac{\partial f}{\partial x_i}, 1 \leq i \neq j \leq n \tag{8}$$

and

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ii}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} + b_i \frac{\partial f}{\partial x_i}, 1 \leq i \leq n \tag{9}$$

Proof The characteristic function of  $X$  is

$$g(t) = e^{i\beta' \Sigma t - \frac{1}{2} t' \Sigma t}, t = (t_1, t_2, \dots, t_n)'$$

The density function  $f(x)$  of  $X$  can be represented as follows

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{ix'g(t)} dt \tag{10}$$

By differentiating both sides of (10), we can easily obtain (8) and (9).

Lemma 3 is very useful. For  $\beta=0$ , it is a well-known formula in Plackett<sup>[6]</sup>.



With the above lemmas, we now prove the main theorem in Section 1.

**Proof of Theorem 1** Notice the invariance of the distribuion of  $|X| = (|X_1|, |X_2|, \dots, |X_n|)$  under the linear transformation  $X' = DX$ , where  $D$  is a signature matrix. We may assume that  $\Sigma^{-1} = -(a_{ij})$  is an  $M$ -atrix, and that  $b_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n$ . Let  $f(x)$  be p. d. f. of  $X$ , and define

$$P_1(c_1, c_2, \dots, c_n, \Sigma) = \int_{-c_1}^{c_1} \dots \int_{-c_n}^{c_n} f(x) dx$$

It suffices to prove that  $P_1(c_1, c_2, \dots, c_n, \Sigma)$  is nondecreasing in  $\sigma_{ij}, i \neq j$ . i. e.

$$\frac{\partial P_1}{\partial \sigma_{ij}} \geq 0 \text{ for } i \neq j \tag{11}$$

By Lemma 3

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1}{\partial \sigma_{12}} &= \int_{-c_1}^{c_1} \dots \int_{-c_n}^{c_n} \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} + b_1 \frac{\partial f}{\partial x_2} + b_2 \frac{\partial f}{\partial x_1} \right) dx_1 \dots dx_n \\ &= I_1 + b_1 I_2 + b_2 I_3 \end{aligned} \tag{12}$$

First we'll prove that  $I_3 \geq 0$ . Let  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)'$  be a vector where  $\sigma_i = \pm 1, 1 \leq i \leq n$ , and define

$$\begin{aligned} 2A_1 &= a_{11}c_1^2 + \sum_{2 \leq i \leq n} a_{ii}x_i^2 - \beta' \sum \beta \\ B_1(\sigma) &= \sum_{2 \leq i < j \leq n} a_{ij}\sigma_i\sigma_jx_j + \sum_{2 \leq i \leq n} b_i\sigma_ix_i \\ B_2(\sigma) &= c_1 \sum_{2 \leq j \leq n} a_{1j}\sigma_jx_j \end{aligned}$$

Using these notations, we have

$$\begin{aligned} I_3 &= \int_{-c_1}^{c_1} \dots \int_{-c_n}^{c_n} \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 \dots dx_n \\ &= \int_{-c_2}^{c_2} \dots \int_{-c_n}^{c_n} [f(c_1, x_2, \dots, x_n) - f(-c_1, x_2, \dots, x_n)] dx_2 \dots dx_n \\ &= k \int_0^{c_2} \dots \int_0^{c_n} e^{A_1} \sum_{\sigma \in \Delta} \exp(B_1(\sigma)) [e^{B_2(\sigma) + b_1c_1} - e^{-B_2(\sigma) - b_1c_1}] dx_2 \dots dx_n \end{aligned} \tag{13}$$

where  $k$  is a positive constant, and  $\Delta = \{\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)'; \sigma_i = \pm 1, 1 \leq i \leq n\}$ . In order to show that  $I_3 \geq 0$ , it suffices to show that the sum in (13) is nonnegative for any  $x_i \geq 0, 2 \leq i \leq n$ . We now construct a random vector  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)'$  with p. d. f. given by

$$P(\sigma) = k_1 \exp[B_1(\sigma)], \sigma \in \Delta$$

where  $k_1$  is a normalizing constant.

Noticing that  $b_1c_1 \geq 0$ , by Lemma 2

$$E\{\exp[B_2(\sigma) + b_1c_1]\} \geq E\{\exp[-B_2(\sigma) - b_1c_1]\}$$

From (13), it follows that  $I_3 \geq 0$ . Similarly, we have  $I_2 \geq 0$ .

Secondly, we'll prove that  $I_1 \geq 0$ . Define

$$\begin{aligned} 2A_2 &= a_{11}c_1^2 + a_{22}c_2^2 - \beta' \sum \beta + \sum_{3 \leq i \leq n} a_{ii}x_i^2 \\ B_3(u) &= \sum_{3 \leq i < j \leq n} a_{ij}x_ju_iu_j + \sum_{3 \leq i \leq n} b_ix_iu_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B_4(\mathbf{u}) &= c_1 \sum_{3 \leq i \leq n} a_{1i} x_i u_i \\
 B_5(\mathbf{u}) &= c_2 \sum_{3 \leq j \leq n} a_{2j} x_j u_j
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

and now consider another random vector  $U = (U_1, U_2, \dots, U_n)'$  with p. d. f. given by

$$P(U = \mathbf{u}) = k_2 \exp[B_3(\mathbf{u})], \mathbf{u} \in \Delta$$

which satisfies the condition of Lemma 1 for  $x_j \geq 0, j = 3, \dots, n$ .

Using the notation (14), and setting  $t_1 = a_{12}c_1c_2, t_2 = b_1c_1, t_3 = b_2c_2$ , we have

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \int_{-c_1}^{c_1} \dots \int_{-c_n}^{c_n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} dx_1 \dots dx_n \\
 &= \int_{-c_3}^{c_3} \dots \int_{-c_n}^{c_n} [f(c_1, c_2, x_3, \dots, x_n) - f(c_1, -c_2, x_3, \dots, x_n) \\
 &\quad - f(-c_1, c_2, x_3, \dots, x_n) + f(-c_1, -c_2, x_3, \dots, x_n)] dx_3 \dots dx_n \\
 &= k_3 \int_0^{c_3} \dots \int_0^{c_n} e^{t_2} \sum_{\mathbf{u} \in \Delta} e^{B_3(\mathbf{u})} [e^{B_4(\mathbf{u}) + B_5(\mathbf{u}) + t_1 + t_2 + t_3} - e^{B_4(\mathbf{u}) - B_5(\mathbf{u}) - t_1 + t_2 - t_3} \\
 &\quad - e^{-B_4(\mathbf{u}) + B_5(\mathbf{u}) - t_1 - t_2 + t_3} + e^{-B_4(\mathbf{u}) - B_5(\mathbf{u}) + t_1 - t_2 - t_3}] dx_3 \dots dx_n \\
 &= k_4 \int_0^{c_3} \dots \int_0^{c_n} e^{t_2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l)!} \{e^{t_1} E[B_4(U) + B_5(U) + t_2 + t_3]^{2l} \\
 &\quad - e^{-t_1} E[-B_4(U) + B_5(U) - t_2 + t_3]^{2l}\} dx_3 \dots dx_n \\
 &\geq 0
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

here  $k_3$  and  $k_4$  are positive constants. The lasting inequality in (15) follows from Lemma 2 and fact  $t_1 \geq 0$ .

From (12), we get

$$\frac{\partial P_1}{\partial \sigma_{12}} \geq 0$$

Similarly, we can prove (11), so complete the proof of Theorem 1.

**Proof of Theorem 2** We may assume that  $\Sigma^{-1}$  is an  $M$ -matrix, and  $b_i \geq 0, 1 \leq i \leq r$ . It suffices to prove that

$$\frac{\partial P_2}{\partial \sigma_{ij}} \leq 0 \text{ for } 1 \leq i \leq r < j \leq n \tag{16}$$

where

$$P_2(c_1, c_2, \dots, c_n, \Sigma) = P[|X_k| \leq c_k, |X_l| \geq c_l, 1 \leq k \leq r < l \leq n]$$

For any fixed  $i, j, i \leq r < j$ . Let  $B = \{|X_k| \leq c_k, |X_l| \geq c_l, k \leq r < l, k \neq i, l \neq j\}$

so that

$$P_2(c_1, c_2, \dots, c_n, \Sigma) = P[|X_i| \leq c_i, B] - P[|X_i| \leq c_i, |X_j| \leq c_j, B] \tag{17}$$

Noticing that the only property of the region of integration we used was sign invariance, thus it follows that  $P[|X_i| \leq c_i, |X_j| \leq c_j, B]$  is nonincreasing in  $\sigma_{ij}$ . Moreover  $P[|X_i| \leq c_i, B]$  doesnot depend on  $\sigma_{ij}$ . Taking partial derivatives on both sides of (17), the monotonicity result (16) follows.

**Remark** For  $\beta = 0$ , the proof of the result in [3] based on the fact that  $Z = \exp[B_3(U)]$ , defined by (14), has a "reciprocally symmetric" property, that is,  $Z$  and  $Z^{-1}$  have the same distribu-

tions. However, for  $\beta \neq 0$  here,  $Z$  does not have this property.

The author would like thank Dr. Fang Zhaoben for his stimulating discussion and careful reading of the manuscripts.

#### References

- [1] Slepian D, *Bell System Tech. J.*, 41(1962), 463—501.
- [2] Sidák Z, *Ann. Math. Statist.*, 39(1968), 1425—1434
- [3] Bolviken E and Joag—dev K, *Scand. J. Statist.*, 9(1982), 171—174.
- [4] Kelly D G and Sherman S, *J. Math. Phys.*, 9(1968), 466—484.
- [5] Karlin S and Rinott Y, *J. Multivariate Anal.*, 10(1980), 467—498.
- [6] Plackett R L, *Biometrika.* 4(1954), 351—360.

## 均值非零的多元正态分布函数矩形区域的 概率质量单调性

胡 太 忠

(数 学 系)

### 摘 要

设  $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)' \sim N_n(\Sigma\beta, \Sigma)$ , 其中  $\beta \in R^n$ ,  $\Sigma = (\sigma_{ij})$ . 如果  $\beta$  的所有分量同时非负或同时非正, 且存在对角元取值  $\pm 1$  的对角矩阵  $D$  使得  $-D\Sigma^{-1}D$  的非对角元元素非负, 则  $P[|X_j| < c_j, j=1, 2, \dots, n]$  关于所有  $|\sigma_{ij}|, i \neq j$  为非降的, 其中  $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)'$  为任意的. 此结论推广了 Bolviken 和 Joag—dev(1982)的结果.

**关键词:** 概率质量的单调性, Slepian 引理, 多元正态分布

**中图法分类号:** O212.4

# $O(^3p)$ 原子与乙醚和异丙醚化学 反应速率常数的测定

陈从香 周惠林 余枝广

(近代化学系)

## 摘 要

用流动放电-化学发光技术测定了 $O(^3p)$ 原子与乙醚和异丙醚总包二级反应速率常数. 反应速率常数与温度关系可表达为

$$k_1 = (1.91 \pm 0.70) \times 10^{-11} \exp[-(2.14 \pm 0.16) \text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}/RT] \\ \cdot \text{cm}^3 \cdot \text{molec.}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ [\text{O}(^3p) + \text{乙醚}]$$

$$k_2 = (3.25 \pm 0.80) \times 10^{-11} \exp[-(2.57 \pm 0.20) \text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}/RT] \\ \cdot \text{cm}^3 \cdot \text{molec.}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ [\text{O}(^3p) + \text{异丙醚}]$$

还讨论了醚分子中氧原子对 $\alpha$ -位C-H键能及其反应活化能的影响. 结果表明, 氧原子使 $\alpha$ 位C-H键能减弱而降低了反应活化能.

关键词: 动力学,  $O(^3p)$ 原子, 醚分子

中图法分类号: O643.11

## 1 引言

对 $O(^3p)$ 原子和有机分子的化学反应动力学进行了大量的研究. 通常认为, 在无双键存在的碳氢化合物分子中, 基元反应都是氢抽提反应. 对醚类分子和 $O(^3p)$ 原子的反应研究得不多. 乙醚和 $O(^3p)$ 原子反应速率常数测定, 我们仅见Wagner等人作过报道<sup>[1,2]</sup>, 而异丙醚和

$O(^3p)$  的反应研究则未见报道。

本文用流动放电-化学发光方法测定  $O(^3p)$  原子与乙醚和异丙醚反应速率常数, 并就醚分子中氧原子对 C-H 键能及其反应活性的影响作了讨论。

## 2 实验

实验方法同文献[3]、[4], 即用微波放电的方法将  $O_2$  分子离解成氧原子; 直接往检测器中连续注入一定量的 NO 分子, 与  $O(^3p)$  原子反应生成电子激发态的  $NO_2^*$ 。实验证明, 该分子放出的化学发光强度正比于  $O(^3p)$  原子的浓度。在保持其它条件不变的条件下, 测定化学发光强度的相对变化, 就是  $O(^3p)$  原子浓度的相对变化。用改变反应混合物在流动管中流过的距离 (保持流速不变) 来改变反应时间, 即用改变空间尺度的办法来改变时间尺度。实验中, 保持醚类分子的浓度与  $O(^3p)$  原子浓度比大于 100, 以满足关于  $O(^3p)$  原子的假一级反应条件。数据处理方法亦同[3]、[4]。文中误差为线性拟合的标准偏差的 2 倍, 为  $2\sigma$ 。

实验中所用的  $O_2$  纯度为 99.995% (北京氧气厂), Ar 为 99.999% (南京特种气体公司), 都为钢瓶气体, 未经进一步纯化。NO 气同[3, 4]。乙醚 (徐州试剂厂) 和异丙醚 (上海试剂一厂) 都为分析纯, 经低压去气和减压蒸馏纯化。 $O_2$ 、NO 和醚类分子按一定浓度要求 (Ar 气中) 事先配制在 5L 的贮气瓶中备用。

## 3 结果和讨论

$O(^3p)$  原子与醚类分子反应都为氢原子抽提反应, 不同 C-H 键上的氢被抽提可视作不同反应通道, 具有不同的反应速率常数。总包反应速率常数则为这些通道反应速率常数之和。当醚类分子浓度大于  $O(^3p)$  原子浓度时, 关于  $O(^3p)$  浓度的假一级反应速率常数  $k' = k[\text{醚分子}] + k''$  ( $k''$  经测定并对  $k'$  进行了校正),  $k$  为总包二级反应速率常数。将实验测得的并经校正的  $k'$  和醚分子浓度的 stern-volmer 关系示于图 1 和图 2。由图示各点进行线性拟合得到的总包二级反应速率常数列于表 1 和表 2。表中  $k$  的单位均为  $10^{-13} \text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

表 1  $O(^3p)$  和乙醚二级反应速率常数测定值

T/K	313	343	373	403	433	463
k	5.6±0.8	8.3±1.2	11.4±0.8	13.0±1.8	15.8±2.6	19.8±1.4

表 2  $O(^3p)$  和异丙醚二级反应速率常数测定值

T/K	313	343	373	403	433	463
k	5.1±1.2	7.6±0.4	10.7±0.8	12.6±1.0	16.8±2.4	19.6±2.8

将反应速率常数  $k$  和温度  $T$  的关系用 Arrhenius 公式拟合, 即用  $\ln k$  对  $1/T$  作图, 示于图 3 和图 4, 得 Arrhenius 参数。  $k$  与  $T$  的关系式表达如下:

$$k_1 = (1.91 \pm 0.70) \times 10^{-11} \exp[-(2.14 \pm 0.16) \text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1} / RT] \text{cm}^3 \text{molec.}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$



和

$$k_2 = (3.25 \pm 0.80) \times 10^{-11} \exp[-2.57 \pm 0.20 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1} / RT] \text{ cm}^3 \cdot \text{molec.}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

O(<sup>3</sup>p) + 异丙醚 (2)

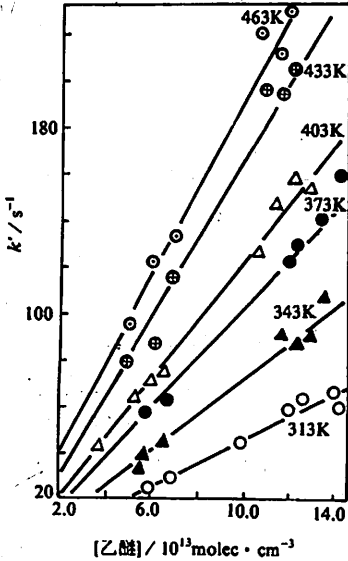


图 1 O(<sup>3</sup>p) + 乙醚反应速率的 stern-volmer 图

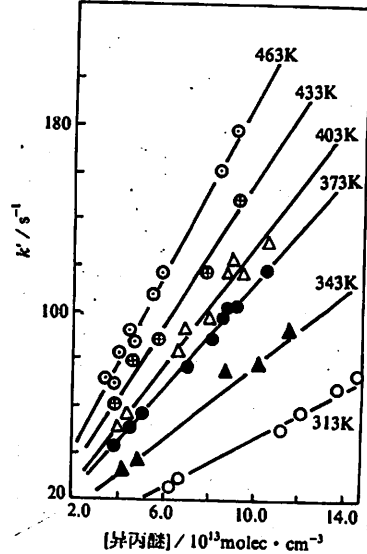


图 2 O(<sup>3</sup>p) + 异丙醚反应速率的 stern-volmer 图

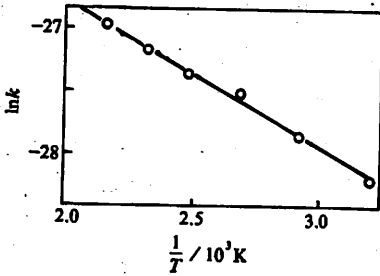


图 3 O(<sup>3</sup>p) 和乙醚反应速率常数的 Arrhenius 关系

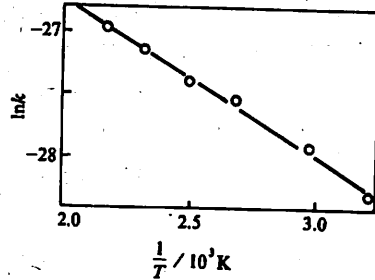


图 4 O(<sup>3</sup>p) 和异丙醚反应速率常数的 Arrhenius 关系

如前所述, O(<sup>3</sup>p) 原子和乙醚反应速率常数测定的报道仅见于文献[1, 2], 它们的结果分别为

$$k = (1.11 \pm 0.58) \times 10^{-13} \text{ cm} \cdot \text{molec.}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

(T = 298K)

和

$$k = (9.96 \pm 3.00) \times 10^{-11} \exp[-3.89 \pm 0.77 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1} / RT] \text{ cm}^3 \text{ molec.}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

(T = 293K ~ 408K)

用我们测定的 O(<sup>3</sup>p) 与乙醚反应速率常数和文献[2]的结果进行比较. 室温下(298K), 本文的结果为  $5.14 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ molec.}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , 文献[2]的结果为  $1.40 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ molec.}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , 前者为后者的 3.7 倍, 指前因子和活化能都比[2]的小. 从实验方法来说, 二者相近, 都为快速流动放电

方法,还无法对这一差异从实验上作出满意的解释.现就本文和文献[2]获得的反应活化能进行讨论.先比较一下二甲醚、 $C_2H_6$ 与  $O(^3p)$  的反应.二甲醚分子除去氧原子外的部分和乙烷相同,且 6 个 C—H 键都是等价的.二甲醚和  $O(^3p)$  反应活化能为  $4.57\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ [5],而乙烷和  $O(^3p)$  反应的活化能为  $6.56\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ [6],二者约相差  $2\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ .可以认为,这是由于二甲醚中的氧原子的亲电子性而使甲基中 C—H 键减弱. Evans 和 Polanyi 将反应中断裂的键能和反应活化能联系起来,提出了经验的 Evans—Polanyi 关系式[7].由  $O(^3p)$  对有机分子中的氢原子抽提反应来说,有关系式

$$E = a[D(C-H) - c]$$

式中,  $E$  为反应活化能,  $D(C-H)$  为被抽提的氢原子所在的 C—H 键的离解能,  $a$  和  $c$  为经验参数.在此,  $a=0.36$ ,  $c=82.0\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ [8].已知  $CH_3CH_3$  和  $CH_3OCH_3$  分子中的 C—H 键能分别为  $98\pm 1\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$  和  $92.9\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ [9].由 Evans—Polanyi 关系式可估算出氢被氧原子抽提的活化能分别为  $5.82\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$  和  $3.94\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ ,略小于[6]和[5]报道的实验测定值,但都基本符合.可见将上述 Evans—Polanyi 关系式用于  $O(^3p)$  和醚类分子反应还是比较成功的.二乙醚分子除氧原子外的部分和  $n-C_4H_{10}$  相同.据文献[9],  $n-C_4H_{10}$  中的二级氢的 C—H 键能为  $94.6\pm 1\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ ;据文献[10],乙醚分子中二级氢 C—H 键能比一级氢的 C—H 键能低  $4.6\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ .假定二乙醚中一级 C—H 键能和二甲醚中一级 C—H 键能相同,则可知二乙醚中二级 C—H 键能为  $88.3\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ .考虑到分子性质的加和性[11],总包反应速率常数是分子中所有处于不同位置的原子发生同类反应的速率常数之和,如  $n-C_4H_{10}$  和二乙醚分子中氢抽提反应的总包反应速率常数是所有一级氢和二级氢抽提反应速率常数之和.研究表明,总包反应速率常数主要来自弱键部分反应的贡献,总包反应表观活化能也主要由弱键部分反应活化能决定的.在温度不是太高时,尤为突出[12,13].在  $O(^3p)$  原子与正丁烷和二乙醚反应中,总包反应速率常数主要来自二级 C—H 键的反应部分,反应活化能亦主要由二级 C—H 键上的反应活化能决定.我们将 Evans—Polanyi 关系式用于  $O(^3p)$  与  $n-C_4H_{10}$  和二乙醚的二级氢抽提反应,可得反应活化能分别为  $4.56\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$  和  $2.29\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ .前者与文献[12]的实验结果基本符合,后者与我们的实验结果基本符合.因此,可以得出结论,我们实验测定的反应活化能值较之文献[2]的活化能值要更可靠些.

异丙醚和  $O(^3p)$  反应速率常数测定未见文献报道.异丙醚中含有两个三级氢.在一般有机分子中,三级氢的 C—H 键能要小于二级氢的 C—H 键能,因此其反应活化能要低于二级氢的反应活化能.在醚分子中,由于氧原子的存在,  $\alpha$  位上的 C—H 键受其诱导作用,键能最多约减小几个  $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ .但氧原子对  $\alpha$  位上二级氢和三级氢的 C—H 键能的减小并非等值,对三级氢的诱导作用弱于对二级氢的诱导作用.因为  $\alpha$  位二级氢所连的碳原子连接一个烷基和 2 个氢原子,而三级氢所连的碳原子连接 2 个烷基和一个氢原子.由于烷基在一定条件下是给电子的[13],所以氧原子的吸电子性从烷基得到部分满足,而使其对  $\alpha$  位三级 C—H 键的诱导作用减弱.从表(1)、表(2)、式(1)和式(2)可见,我们测定的  $O(^3p)$  与乙醚和异丙醚反应速率常数相近,反应活化能也相近.这意味着,乙醚分子中氧原子  $\alpha$  位二级氢的 C—H 键能和异丙醚中  $\alpha$  位三级氢的 C—H 键能相近.在研究  $O(^3p)$  原子和醇类分子反应动力学时,曾估算了  $O(^3p)$  原子对各类 C—H 键上的氢原子抽提反应的活化能和指前因子[14].我们发现,处于 OH 基  $\alpha$  位的二级氢( $n-C_3H_7OH$ ,  $n-C_4H_9OH$  和  $i-C_5H_{11}OH$  分子中)和三级氢( $i-C_3H_7OH$  分子中)与  $O(^3p)$  反应

的活化能相近,分别为  $2.0\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$  和  $2.1\text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。这也意味着,OH基 $\alpha$ 位的二级氢和三级氢的C—H键能相近。从上述分析可以得出这样的结论,强吸电子性的原子或基因 $\alpha$ 位二级氢和三级氢所连的C—H键具有相近的键能。

### 参 考 文 献

- [1] Faubel C, Hoyerman K and Wagner H G, *Z. Phys. Chem., N. F.*, 130 (1982), 1.
- [2] Mix K H and Wagner H G, *Oxidation Communications*, 5(1983), 321.
- [3] 陈从香、罗志坚、戴静华、刘军, *中国科技大学学报* 18(1988), 115.
- [4] 陈从香、罗志坚、戴静华、俞书勤, *化学物理学报*, 1(1988), 93.
- [5] Herron J T, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 17 (1988), 1001.
- [6] Westenberg A A and deHass N, *J. Chem. Phys.*, 46 (1967), 490.
- [7] Evans M G and Polanyi M, *Trans. Faraday Soc.*, 34 (1938), 11.
- [8] Trotman—Dickenson A F, *Advan. Free Radical Chem.*, 1, (1963), 1.
- [9] Gray P, Herod A A and Jones A, *Chemical Reviews*, 71 (1971), 247.
- [10] Kurze Mitteilungen, *Zeitschrift Fur, Physikalische Chemie Neue Folge, Bd.*, 85 (1973), 221—224.
- [11] Bensen S W, *Thermochemical Kinetics*, 2nd edition, John Willy & Sons, New York, 1976:24.
- [12] Herron J T and Huie R E, *J. Phys. Chem.*, 75 (1969), 3327.
- [13] 邢其毅、徐瑞秋、周政, *基础有机化学(下册)*, 高等教育出版社, 1983:72.
- [14] 陈从香、高义德、朱梦霞、王利、俞书勤, *化学物理学报*, 3(1990), 186.



# The Measurements of Rate Constants for Reactions of $O(^3p)$ Atoms With Ether and Isopropyl Ether Molecules

Chen Congxiang Zhou Huilin Yu Zhiguang

(Department of Modern Chemistry)

## Abstract

This paper presents the measurements of rate constants for reactions of  $O(^3p)$  atoms with ether and isopropyl ether molecules by using discharge flow-chemiluminescence technique. The Arrhenius parameters are derived. The rate constants over temperature range 313–463K for these reactions can be expressed as follows:

$$k_1 = (1.91 \pm 0.70) \times 10^{-11} \exp(- (2.14 \pm 0.16) \text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1} / RT) \text{cm}^3 \cdot \text{molec}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

(for  $O(^3p)$  + ether)

$$k_2 = (3.25 \pm 0.80) \times 10^{-11} \exp(- (2.57 \pm 0.20) \text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1} / RT) \text{cm}^3 \cdot \text{molec}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

(for  $O(^3p)$  + isopropyl ether)

The discussion of effects of oxygen atom in ether molecules on the C—H bond strength as well as the activation energy of reaction of the C—H bond is presented. It is found that the induction of oxygen atoms in ether molecules reduces the strength of the C—H bond as well as the activation energy which is in  $\alpha$  position of oxygen atoms.

**Key words:** kinetics,  $O(^3p)$  atom, ether molecule

# 柱位形等离子体中气球模的相干结构\*

陈银华 朱栋培

(近代物理系)

## 摘 要

本文研究等离子体柱中非线性气球模, 导出了描述柱位形下等离子体中气球模的非线性方程组, 并求出该方程组的局域涡旋解. 这类新解由柱对称和反对称两部分组成, 称为气球柱涡旋. 当涡旋中心离柱轴距离远小于涡旋半径时, 它退化为单涡旋; 而在相反的情况下, 它又退化为通常的偶极涡旋. 涡旋角速度允许区强烈地依赖于磁场力线的曲率.

关键词: 柱位形等离子体, 涡旋, 气球模

中图法分类号: O533

## 1 引言

近十年来, 人们对于磁化等离子体中各种低频模极为关注. 这些低频模通过自相互作用将形成二维或准二维的相干结构, 即所谓的涡旋结构. 它们能与等离子体粒子相互作用, 将粒子捕获, 并携带其横越磁力线运动. 因此, 这些相干结构的形成和运动对于聚变等离子体的约束和输运可能有重要影响. 人们对于等离子体中的各种低频静电模<sup>[1,2]</sup>和一些低频电磁模<sup>[3,4,5]</sup>的非线性行为作了大量的研究. 在磁约束等离子体的坏曲率区, 还可能激发一类低频电磁模, 即气球模. 这种模对于等离子体的平衡和稳定具有重要影响. 人们对于气球模的线性理论已作了广泛深入的研究<sup>[6]</sup>, 近年来, 又开始研究气球模的非线性相干结构<sup>[7,8]</sup>, 但都局限于平板模型. 本文研究柱位形等离子体中的非线性气球模. 这种位形与实际等离子体位形比

1991年6月7日收到.

\* 中国科学院LWTZ-1298资助项目.

较接近. 采用这种位形得到的理论结果比较容易在实验上得到验证. 研究表明, 柱位形下等离子体中的气球模将自组织成一类新型的局域涡旋. 由解的结构知, 它含有柱对称和反对称两部分, 每一涡旋由强度不等的气旋(cyclone)和反气旋(anticyclone)组成, 涡旋角速度允许区随约束磁场力线的曲率的增大而变宽.

## 2 非线性模方程组

设低  $\beta$  ( $\beta \ll 1$ ) 等离子体处于均匀的外磁场  $B_0 = B_0 e_z$  中. 为了考虑磁场力线的曲率效应, 引入等效重力  $g = g(r) e_r$ ,  $e_r, e_z$  分别是柱坐标系中  $r$  方向和  $z$  方向的单位向量. 平衡等离子体密度沿径向分布,  $\nabla n_0(r) \parallel e_r$ . 气球模的扰动电磁场可表示成

$$E = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \partial_t A_z e_z \quad (1)$$

$$B_{\perp} = \nabla_{\perp} A_z \times e_z \quad (2)$$

考虑到  $\beta \ll 1$ , 已经略去了扰动磁场的压缩分量; 式中的  $\varphi, A_z$  分别是扰动标势和扰动矢势的纵向分量. 在漂移近似 ( $\partial_t \ll \omega_{ci} = eB_0/m_i c$ ,  $\omega_{ci}$  为离子回旋频率) 下, 电子和离子流体的速度垂直于外磁场的分量分别为

$$V_{\perp} = V_E + V_{\perp} B_{\perp} / B_0 \quad (3)$$

$$V_{i\perp} = V_E + V_i - (c/\omega_{ci} B_0) (\partial_t + V_i \cdot \nabla + V_E \cdot \nabla) \varphi \quad (4)$$

其中

$$V_E = (c/B_0) \nabla\varphi \times e_z$$

$$V_i = - (g/\omega_{ci}) e_r$$

$V_E, V_i$  分别为电漂移速度和等效重力漂移速度.

假定波的平行相速  $\omega/k_z$  远大于声速  $C_s = (T_e/m_i)^{1/2}$ , 则可略去离子的纵向运动. 由安培定律的纵向分量, 略去位移电流, 我们可得到电子流体纵向速度  $V_{ez}$  和矢势的纵向分量  $A_z$  之间的关系<sup>[3,4]</sup>

$$V_{ez} = \frac{c}{4\pi en_0} \Delta_{\perp} A_z \quad (5)$$

其中  $\Delta_{\perp} = \partial^2/\partial r^2 + \partial/r\partial r + \partial^2/r^2\partial\theta^2$ . 扰动电流可近似地表示成

$$J = en_0(V_{i\perp} - V_{e\perp}) - en_0 v_{ez} e_z \quad (6)$$

描述气球模的方程组为准中性条件下的电荷守恒方程, 电子连续性方程和理想磁流体的欧姆定律的纵向分量<sup>[3]</sup>

$$\nabla_{\perp} \cdot J_{\perp} + \partial_z J_z = 0 \quad (7)$$

$$\partial_t n_e + \nabla \cdot (n_e V_e) = 0$$

$$E_z + \frac{1}{c} [V_i \times B]_z = 0 \quad (9)$$

将(1)–(6)式代入方程组(7)–(9)中, 并假定

$$|\partial_r \ln \bar{n}|^{-1}, |\partial_r \ln \varphi|^{-1}, |\partial_r \ln A_z|^{-1} \ll |\partial_r \ln n_0|^{-1}, V_{e\perp} \cdot \nabla \gg V_{ez} \partial_z$$

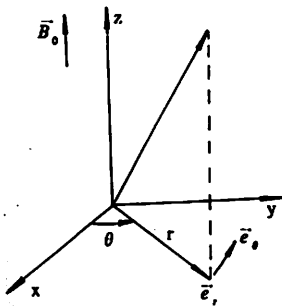


图 1 柱坐标系

经过代数运算,最后可得柱坐标系中描述气球模的非线性方程组

$$[\partial_t + (\mathbf{e}_z \times \nabla \Phi) \cdot \nabla] \Delta_{\perp} \Phi + [\partial_z - (\mathbf{e}_z \times \nabla \Psi) \cdot \nabla] \Delta_{\perp} \Psi + \omega_p \partial_r (\Delta_{\perp} \Phi - \bar{n}) = 0 \quad (10)$$

$$[\partial_t + (\mathbf{e}_z \times \nabla \Phi) \cdot \nabla] \bar{n} + [\partial_z - (\mathbf{e}_z \times \nabla \Psi) \cdot \nabla] \Delta_{\perp} \Psi - \kappa_s \partial_r \Phi = 0 \quad (11)$$

$$[\partial_z - (\mathbf{e}_z \times \nabla \Psi) \cdot \nabla] \Phi + (\partial_t + \omega_p) \Psi = 0. \quad (12)$$

其中,  $\bar{n} = n_1/n_0$ ,  $n_1$  为扰动密度. 在得到方程组(10)–(12)时, 我们已假定平衡等离子体密度服从高斯分布,  $n_0(r) = n_0(0) \exp(-r^2/r_0^2)$ ,  $n_0(0)$  是柱轴处的平衡密度,  $r_0$  是等离子体非均匀性的径向特征线度; 等效重力加速  $g(r)$  是  $r$  的线性函数,  $g(r) = g_0 r/r_0$ ,  $g_0$  是  $r=r_0$  处的重力加速度,  $r_0$  是存在磁场弯曲的径向特征尺度, 式中  $\omega_p = -g_0/\omega_p^2 r_0$ ,  $\kappa_s = 2\rho_s^2/r_0^2$ . 此外, 我们对扰动量进行无量纲化  $\Phi = e\varphi/T_e$ ,  $\Psi = (eA_z/T_e)(V_A/c)$ ,  $t, r, z$  分别用  $\omega_p^{-1}, \rho_s, c/\omega_p$  无量纲化, 其中  $\rho_s^2 = T_e/\omega_p^2 m_i$ ,  $\omega_p = (4\pi n_0 e^2/m_i)^{1/2}$  为离子振荡频率,  $v_A = (B_0^2/4\pi n_0 m_i)^{1/2}$  为阿尔芬速度.

### 3 非线性方程组的局域正则解

我们寻求方程组(10)–(12)的局域涡旋解, 这种涡旋的中心离柱轴距为  $R$ , 且以角速度  $\omega$  绕柱轴旋转. 设扰动量  $\Phi, \Psi$  和  $\bar{n}$  是  $r, \eta$  的函数, 其中  $\eta = \theta + az - \omega t$ ,  $\alpha^{-1}\omega$  表征波沿柱轴方向的运动速轴方向的运动速度,  $\alpha, \omega$  为常数. 显然,  $\partial_t = -\omega \partial_r, \partial_r = \partial_r, \partial_z = \alpha \partial_r$ , 这时非线性方程组可改写成

$$\hat{D} \Delta_{\perp} \Phi - (\alpha/\omega) \hat{D}_1 \Delta_{\perp} \Phi - (\omega_p/\omega) \partial_r (\Delta_{\perp} \Phi - \bar{n}) = 0 \quad (13)$$

$$\hat{D} \bar{n} - (\alpha/\omega) \hat{D}_1 \Delta_{\perp} \Psi + (\kappa_s/\omega) \partial_r \Phi = 0 \quad (14)$$

$$\hat{D}_1 [\Phi + (\omega_p - \omega) \Psi/\alpha] = 0 \quad (15)$$

其中

$$\hat{D} = \partial_r - (1/\omega) \mathbf{e}_z \times \nabla \Phi \cdot \nabla$$

$$\hat{D}_1 = \partial_r - (1/\alpha) \mathbf{e}_z \times \nabla \Psi \cdot \nabla$$

由(15)式可得到  $\Psi$  与  $\Phi$  之间的关系

$$\Psi = \frac{\alpha}{\omega - \omega_p} \Phi \quad (16)$$

这里我们假设  $\omega \neq \omega_p$ . 将(16)式代入(13), (14)式并写成泊松括号形式

$$\left[ \left( 1 - \frac{\alpha^2}{(\omega - \omega_p)^2} \right) \Phi + \frac{1}{2} \left( \omega_p - \omega + \frac{\alpha^2}{\omega - \omega_p} \right) r^2, \Delta_{\perp} \Phi \right] - \left[ \frac{1}{2} \omega_p r^2, \bar{n} \right] = 0 \quad (17)$$

$$\left[ \Phi - \frac{1}{2} \omega r^2, \bar{n} + \frac{\kappa_s}{\omega} \Phi \right] - \left[ \frac{\alpha}{\omega - \omega_p} \Phi - \frac{1}{2} \alpha r^2, \frac{\alpha}{\omega - \omega_p} \Delta_{\perp} \Phi \right] = 0 \quad (18)$$

其中

$$[f, g] = \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial f}{\partial r} \cdot \frac{\partial g}{\partial \eta} - \frac{\partial f}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial g}{\partial r} \right]$$

为了求得方程组(17), (18)的局域正则解, 我们把坐标变换到原点在离柱轴  $R$  处的局域波中心的极坐标系  $(r', \theta')$ .  $\theta'$  是局域波中心运动轨道的切向与考察点矢径之间的夹角. 在新旧坐标之有如下关系,  $r^2 = r'^2 + R^2 + 2Rr' \sin \theta'$ . (见图 2). 将极坐标平面  $(r', \theta')$  分成内区 ( $r' < a$ ) 和外区 ( $r' > a$ ) ( $a$  为涡旋半径).

寻求方程组(17),(18)在外区局域而在内区正则的解. 为此, 扰动量  $\Phi, \bar{n}$  在外区满足

$$\Delta_{\perp} \Phi = k^2 \Phi \quad (19)$$

$$\bar{n} = d\Phi \quad (r > a) \quad (20)$$

在内区满足

$$\Delta_{\perp} \Phi = -p^2 \Phi + \frac{1}{2} C_1 (r^2 + 2Rr \sin \theta + C_0) \quad (21)$$

$$\bar{n} = d_1 \Phi + \frac{1}{2} d_2 (r^2 + 2Rr \sin \theta) \quad (r < a) \quad (22)$$

这里为书写方便起见已略去  $r, \theta$  右上角上的撇号. 式中  $d$  为待定外区参数,  $C_0, C_1, d_1$  和  $d_2$  为待定内区参数,  $k, p$  为涡旋波数. 将(19),(20)代入(17),(18)式可求得  $k^2$  和  $d$  的表达式

$$k^2 = \kappa_s \omega_p (\omega - \omega_p) / [\alpha^2 \omega_p - \omega (\alpha^2 - (\omega - \omega_p)^2)] \quad (23)$$

$$d = k^2 [\alpha^2 - (\omega - \omega_p)^2] / (\omega - \omega_p) \quad (24)$$

由解的局域性要求,  $k^2 > 0$ . 方程(19),(20)的外区解为

$$\Phi_{\text{外}} = \frac{1}{2} a^2 \left[ A_0 K_0(kr) + \frac{R}{a} A_1 K_1(kr) \sin \theta \right] \quad (25)$$

$$\bar{n}_{\text{外}} = \frac{1}{2} a^2 k^2 \cdot \frac{\alpha^2 - (\omega - \omega_p)^2}{\omega_p (\omega - \omega_p)} \left[ A_0 K_0(kr) + \frac{R}{a} A_1 K_1(kr) \sin \theta \right] \quad (26)$$

将(21),(22)式代入(17),(18)式, 可求得内区参数  $C_0, C_1, d_1$  和  $d_2$  所满足的关系

$$-p^2 \left( \omega_p - \omega - \frac{\alpha^2}{\omega_p - \omega} \right) - C_1 \left( 1 - \frac{\alpha^2}{(\omega_p - \omega)^2} \right) = d_1 \omega_p \quad (27)$$

$$-\frac{\alpha^2}{\omega - \omega_p} \left( p^2 - \frac{C_1}{\omega - \omega_p} \right) - \omega d_1 - \kappa_s = d_2 \quad (28)$$

方程(21),(22)的内区解为

$$\Phi_{\text{内}} = \frac{1}{2} a^2 \left[ B_0 J_0(pr) + \frac{C_1}{p^2} \left( \frac{r}{a} \right)^2 + \frac{C_1}{a^2 p^2} \left( C_0 - \frac{4}{p^2} \right) + \frac{R}{a} \left( B_1 J_1(pr) + \frac{2C_1}{p^2} \cdot \frac{r}{a} \right) \sin \theta \right] \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \bar{n}_{\text{内}} = & \frac{1}{2} a^2 \left[ d_1 B_0 J_0(pr) + \left( \frac{C_1 d_1}{p^2} + d_2 \right) \left( \frac{r}{a} \right)^2 + \frac{C_1 d_1}{a^2 p^2} \left( C_0 - \frac{4}{p^2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{R}{a} \left( d_1 B_1 J_1(pr) + 2 \left( \frac{C_1 d_1}{p^2} + d_2 \right) \frac{r}{a} \right) \sin \theta \right] \quad (30) \end{aligned}$$

其中  $J_0, J_1$  为零阶和一阶贝塞尔函数,  $K_0, K_1$  为零阶和一阶修正贝塞尔函数. 系数  $A_0, A_1, B_0, B_1$  由  $\Phi$  及  $\Delta_{\perp} \Phi$  在涡旋边界上连续性条件决定

$$A_0 = \frac{(C_0 + a^2) C_1}{(k^2 + p^2) K_0(ka)} \quad (31)$$

$$A_1 = \frac{2C_1}{(k^2 + p^2) K_1(ka)} \quad (32)$$

$$B_0 = -\frac{C_1}{a^2 p^2 J_0(pa)} \left[ \frac{(C_0 + a^2) k^2}{k^2 + p^2} - \frac{4}{p^2} \right] \quad (33)$$

$$B_1 = \frac{2C_1}{(k^2 + p^2) J_1(pa)} \cdot \frac{k^2}{p^2} \quad (34)$$

内区参数  $d_1, d_2$  可由(27),(28)式确定.  $C_0, C_1$  及  $p^2$  和涡旋半径  $a$  可由  $\bar{n}$  及  $\partial_{\perp} \Phi$  在  $r=a$  处连续

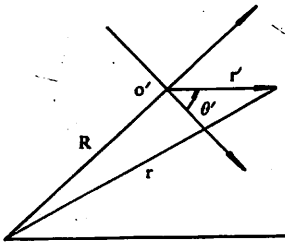


图 2 原点在涡旋中心的极坐标系

的条件决定. 决定  $C_0, C_1$  的方程为

$$dA_1K_1(ka) = d_1B_1J_1(pa) + 2\left(\frac{C_1d_1}{p^2} + d_2\right) \quad (35)$$

$$dA_0K_0(ka) = d_1B_0J_0(pa) + d_2 + \frac{c_1d_1}{p^2} + \frac{c_1d_1}{a^2p^2}\left(C_0 - \frac{4}{p^2}\right) \quad (36)$$

利用(31)-(34)式, 由(35), (36)式求得

$$C_0 = 0 \quad (37)$$

$$C_1 = \frac{(k^2 + p^2)d_2}{d - d_1} \quad (38)$$

确定  $P^2$  和  $a$  的方程为

$$1 - \frac{k^2}{p^2} - \left(\frac{akK_2(ka)}{K_1(ka)} + \frac{apJ_2(pa)}{J_1(pa)}\right) = 0 \quad (39)$$

$$\begin{aligned} k^2 + p^2 - pk\left[\frac{apK_2(ka)}{K_1(ka)} + \frac{akJ_2(pa)}{J_1(pa)}\right] \\ = \frac{2(k^2 + p^2)}{ap} \cdot \frac{J_1(pa)}{J_0(pa)} - \frac{pk}{2}\left[\frac{apK_1(ka)}{K_0(ka)} + \frac{akJ_1(pa)}{J_0(pa)}\right] \end{aligned} \quad (40)$$

涡旋转动角速度允许区由非线性色散关系

$$\kappa_s \omega_s (\omega - \omega_s) / [\alpha^2 \omega_s - \omega(\alpha^2 - (\omega - \omega_s)^2)] > 0 \quad (41)$$

决定. 由于  $\kappa_s > 0$ , 对于磁约束等离子体的坏曲率区有  $\omega_s < 0$ , 于是由不等(41)式得到涡旋角速度允许区为

$$\omega_1 < \omega < \omega_2, \text{ 且 } \omega \neq \omega_s \quad (42)$$

其中

$$\omega_1 = [\omega_s - (\omega_s^2 + 4\alpha^2)^{1/2}]/2$$

$$\omega_2 = [\omega_s + (\omega_s^2 + 4\alpha^2)^{1/2}]/2$$

由于  $\omega_s$  正比于局域磁场力线的曲率, 由  $\omega_1, \omega_2$  的表达式知, 涡旋角速度允许区随磁场力线曲率的增大而变宽.

#### 4 结论

本文研究了等离子体柱中的非线性气球模. 导出了描述非线性气球模的方程组(10)-(12), 求出该方程组的局域正则解(25), (26), (29)和(30), 称为气球柱涡旋解. 与平板模比较, 这类解具有一些新的特点. 首先, 由解的结构, 即由(25), (26), (29)及(30)式可以看到, 这类新解含有柱对称和反对称两部分, 所以每一涡旋由不等强度的气旋(cyclone)和反气旋(anticyclone)组成. 它们以角速度  $\omega$  绕柱轴旋转. 而平板模型得到的解是等强度的偶极涡旋, 它们以速度  $u$  沿直线运动<sup>[8]</sup>. 当局域波中心离柱轴距离远大于涡旋和特征尺度, 即满足  $R/a \gg 1$  时, 柱涡旋解退化为通常的偶极涡旋(dipole vortex); 在相反的极限下, 即满足  $R/a \ll 1$  时, 它们又退化为单涡旋(monopole). 其次, 柱涡旋半径  $a$  由(40)式定出, 这样, 自由参量只有两,  $\alpha$  和  $\omega$ ; 而在通常的平板模情况下, 有三个自由参量<sup>[8]</sup>. 柱涡旋绕轴旋转的角速度  $\omega$  的允许区由(42)式给出. 由  $\omega_1$  和  $\omega_2$  的表达式知, 对于磁场力线曲率大的区域, 角速度允许区较宽, 而对于力线曲率较小的

区域,角速度允许区较窄. 所以,从某种意义上讲,在磁约束等离子体坏曲率区,将可能激发大量的具有不同角速度的涡旋,这可能对该区域的约束和输运性质有更大的影响. 对于本文确定的内外区参数( $d, c_0, c_1, d_1, d_2$ ), 扰动密度  $\bar{n}$  以及扰动标势  $\Phi$  及其第一,二阶导数在涡旋边界上是连续的. 由关系式(16), 这时扰动矢势  $\Psi$  及其第一,二阶导数在涡旋边界上同样连续,因而对应的扰动磁场  $B_{\perp}$  和纵向电流  $j_{\parallel}$  在涡旋边界上也连续. 所以这类解属于 Rossby 型的本性电磁涡旋<sup>[4]</sup>. 由于本文考虑的位形比较接近实际离子体位形, 所以得到的一些结果对于聚变等离子体和空间等离子体的研究可能具有实际意义.

### 参 考 文 献

- [1] Pavlenko V P and Perviashvili V I, *Sov. J. Plasma Phys.*, 8(1983), 603.
- [2] Meiss J D and Horton W, *Phys. Fluids*, 26(1983), 990.
- [3] Mikhailovskii A B *et al.*, *Sov. Phys. JETP*, 59(1984), 1198.
- [4] Liu Jixing and Horton W, *J. Plasma Phys.*, 36(1986), 1.
- [5] Shukla P K and Stenflo 1, *J. Plasma Phys.*, 40(1988), 473.
- [6] Mikhailovskii A B, *Theory of Plasma instabilities*, Vol. 2, Consultants, Burrau, New York, Chap. 7, 1974.
- [7] Mikhailovskii A B, *et al.*, *Phys. Lett. A*, 100(1984), 503.
- [8] Shukla P K and Rao N N, *Phys. Fluids*, 29(1986), 882.

## COHERENT CONSTRUCTURE OF THE BALLOONING MODE IN PLASMA CYLINDER

Chen Yinhua Zhu Dongpei

(Department of Modern Physics)

### Abstract

The nonlinear ballooning mode in plasma cylinder is investigated in this paper. The nonlinear system of equations governing the dynamics of the ballooning mode is derived, and the local vortex solution of this equation system is found. This new type of solution, called the ballooning cylindrical vortex, consists of both axisymmetrical and antisymmetrical parts. When the distance from the centre of vortex to the cylindrical axis is much shorter than the vortex radius, this solution reduces to a monopole, and in the opposite case it becomes the usual dipole vertex. The allowed region of the angular velocity of vortex depends strongly on the curvature of magnetic field lines.

**Key words:** cylindrical plasma, vortex, ballooning mode.

# 链霉菌 M1033 葡萄糖异构酶的分 离纯化及其性质的研究\*

黄婉治 王 淳 刘 兢 崔 涛 刘咸安  
牛立文 王玉珍 徐 洵

(生物系)

## 摘 要

链霉菌 M1033 菌株所产的葡萄糖异构酶培养液经二级  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  沉淀、DEAE-Sephadex A50, Sephadex-G150 柱层析分离纯化, 可得到电泳均一的纯酶。该酶的全分子量为 91000 左右, 由两个相同的亚基组成。其 pI 为 4.3, 经糖染色后证明并非糖蛋白; 最适反应温度  $70^\circ\text{C}$ , 在该温度下分别以 D-木糖和 D-葡萄糖为底物, 测得最适 pH 分别为 8.0 和 8.3。该酶为金属激活酶。  $\text{Co}^{2+}$  和  $\text{Mg}^{2+}$  对该酶有激活作用,  $\text{Ca}^{2+}$  则使之几乎失活。金属离子的激活作用随底物而异。动力学研究表明, 该酶对 D-木糖有更大的亲和性。

关键词: 链霉菌 M1033, D-葡萄糖异构酶, D-木糖异构酶, 金属离子的结合  
中图法分类号: Q558.9

## 1 前言

葡萄糖糖异构酶又称木糖异构酶 (EC5.3.1.5), 属微生物酶类, 能将 D-葡萄糖、D-木糖、D-核糖等转化为相应的酮糖, 是一种具有重大经济效益的工业用酶。在体外一定条件下, 因能催化 D-葡萄糖为 D-果糖, 所以又是工业上大规模从淀粉制备高果糖浆的关键酶。近年来, 日本等国利用蛋白质工程的方法对其进行改造, 以期提高酶的反应速度及在中性和偏酸条件下的酶活力, 延长酶的寿命; 增加果糖产量, 降低成本, 简化工艺<sup>[1]</sup>。我们选用了我国自行筛选的链



霉菌 M1033 菌株<sup>[2]</sup>所产的葡萄糖异构酶进行改造,建立了该酶的分离纯化方法,并对其生化性质的酶动力学性质以及二价金属离子对该酶的作用进行了初步研究。

## 2 材料与方法

### 2.1 材料

酶原液为 M1033 菌株经发酵罐培养、除去菌体的培养液,由山东食品发酵研究设计院和本系微生物遗传室提供;DEAE-Sephadex A-50、Sephadex G-75、Sephadex G-200、两性载体 pH4-6 的 Ampholine 均为 Pharmacia-LKB 公司出品;标准蛋白为 Combithek 出品;咪唑为进口试剂;其它都为国产分析纯试剂。

### 2.2 仪器

LKB 柱层析系统, LKB2117 电泳仪, LKB-4050 分光光度计, 美国 Labconco 冷冻干燥仪。

### 2.3 方法

酶活力测定采用半胱氨酸-咪唑法<sup>[3]</sup>: 0.6mol/L-葡萄糖 250 $\mu$ l 加入葡萄糖异构酶 100 $\mu$ l (相当于 0.2~0.8 活力单位), 0.025mol 三乙醇胺-盐酸 (内含 10mmol  $MgSO_4 \cdot 7H_2O$ ) pH8 的缓冲液 200 $\mu$ l, 在 35 $^{\circ}C$  反应 15 分钟, 再加入 50% 三氯乙酸 50 $\mu$ l 终止反应; 立即加入正在冰浴中冷却的 70% 硫酸 3ml、2.4% 半胱氨酸-盐酸盐 100 $\mu$ l、0.12% 乙醇-咪唑溶液 100 $\mu$ l, 混匀后在 25 $^{\circ}C$  反应 30 分钟; 在 LKB-4050 分光光度计上, 使用波长为 560nm、光程为 1cm 石英杯测其吸收值 A。

在标准反应混合物中, 每分钟产生 1 $\mu$ g 果糖所需的酶量, 定义为 1 个活力单位 (U), 用每毫克葡萄糖异构酶中的酶活力即 U/mg 表示比活力。

蛋白质含量的测定: 采用 Folin-酚法<sup>[4]</sup>, 以牛血清白蛋白作为标准。

分子量的测定: 该酶分子量测定采用 Sephadex-G 200 凝胶过滤法<sup>[5]</sup>, 层析柱 (1.5 $\times$ 70cm) 预先用 0.15mol NaCl 平衡, 温度为 10 $^{\circ}C$ , 标准蛋白是醛缩酶 (158000)、牛血清白蛋白 (67000)、卵白蛋白 (45000)、蔗糖聚糖 2000 和乙酰酪氨酸乙脂。用 SDS-PAGE 测定酶亚基分子量, 凝胶浓度为 7.5%, 标准蛋白是烟草花病毒外壳蛋白 (17500)、碘酸酐酶 (30000)、肌动蛋白 (430000)、牛血清白蛋白 (67000) 及磷酸化酶 B (94000)。

凝胶电泳采用 Disc-PAGE (0.5 $\times$ 10cm) 7.5% 凝胶电泳测定酶的纯度, 同时使用 Schiff 试剂进行糖染色<sup>[6]</sup>。采用 0.5mm 超薄层 PAGE 等电聚焦电泳<sup>[7]</sup>, 两性载体为 pH4~6 的 Ampholine, 以 0.5mol 醋酸和 0.5mol 氢氧化钠作为电极缓冲液测其等电点。

## 3 结果

### 3.1 酶的分离纯化

酶原液以经二级  $(NH_4)_2SO_4$  沉淀, 10000rpm 离心 20 分钟, 收集 25% 至 70%  $(NH_4)_2SO_4$  之间的沉淀物; 在 4 $^{\circ}C$  下进行操作, 沉淀溶于 0.02mol 的三乙醇胺-HCl 缓冲液中 (pH8, 含 1mmol  $CoCl_2$ , 10mmol  $MgSO_4$ ); 经透析脱盐浓缩后, 样品加在预先用 0.05mol 三乙醇胺-HCl 缓冲液 (pH8.0, 含 10mmol  $Mg^{2+}$ 、1mmol  $Co^{2+}$ 、0.1mmol 苯甲磺酰氟) 平衡好的 DEAE-Sephadex A50 柱

(5×80mm)上,流速为 45ml/h,每 10 分钟收集一管,用溶于同一缓冲液中的 0.3~0.5molNaCl

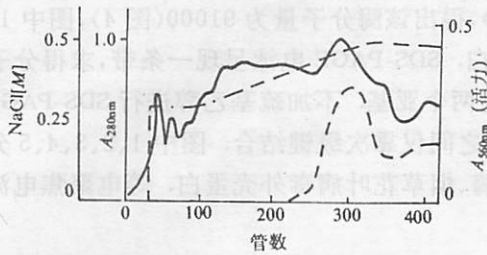


图 1 DEAE-Sephadex-A50 柱层析

——洗脱峰 .....活力峰

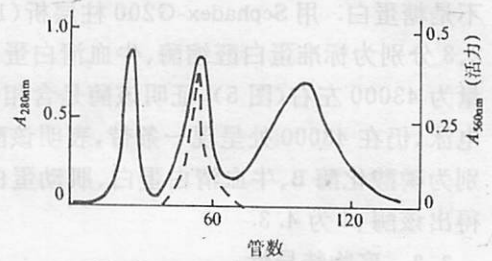


图 2 Sephadex-G150 柱层析

——洗脱峰 .....活力峰

溶液作线性洗脱,大约在 0.4mol NaCl 浓度处出现活力峰(见图 1). 收集浓缩,再经 Sephadex-G 150 柱(2.5×100cm)分离,用 0.15mol NaCl 溶液洗脱(NaCl 溶于上述缓冲液中),流速为 10 ml/h,每 20 分钟收集一管,第二峰为活力峰(见图 2),Disc-PAGE 电泳结果表明该酶已均一(图 3). 收集该活力部位,经透析、脱盐、冷冻干燥后得到该酶的干粉,见表 1.

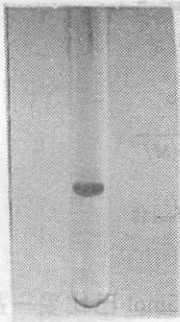


图 3 Disc-PAGE

电泳图谱

表 1 M1033 葡萄糖异构酶的纯化

步 骤	总蛋白量 (mg)	总活力 (U)	比活力 (U/mg)	得率 (%)	纯化倍数
酶原液	25920	1190000	45.9	100	1
二级(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 沉淀	2772	396000	142.9	33	3.1
DEAE-Sephadex A50 柱层析	214	125000	584.1	10.5	12.7
Sephadex-G150 柱层析	48	80200	1670.8	6.7	36.4

### 3.2 酶的理化性质

Disc-PAGE 电泳为一条带(图 3),该电泳采用的凝胶管为 0.5×10cm,凝胶浓度为 7.5%,

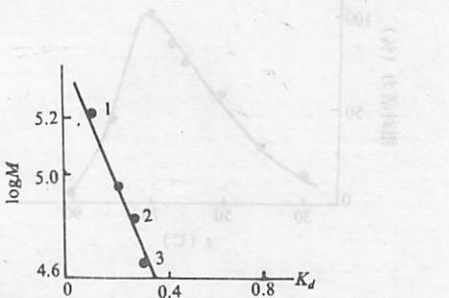


图 4 凝胶过滤法测定分子量

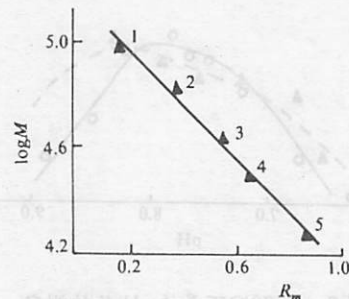


图 5 SDS-PAGE 正电泳法测定亚基分子量

电泳为碱性系统. 以 tris-甘氨酸 pH8.3 为电极缓冲液, 经糖染色后未显现任何条带, 证明该酶不是糖蛋白. 用 Sephadex-G200 柱层析(1.5×70cm), 得出该酶分子量为 91000(图 4), 图中 1、2、3 分别为标准蛋白脲缩酶、牛血清白蛋白、卵白蛋白. SDS-PAGE 电泳呈现一条带, 求得分子量为 43000 左右(图 5), 证明该酶是含相同分子量的两个亚基. 不加巯基乙醇进行 SDS-PAGE 电泳, 仍在 43000 处呈现一条带, 表明该酶两个亚基之间仅靠次级键结合. 图中 1、2、3、4、5 分别为磷酸化酶 B、牛血清白蛋白、肌动蛋白、碘酸酐酶、烟草花叶病毒外壳蛋白. 等电聚焦电泳得出该酶 pI 为 4.3.

### 3.3 底物特异性

将测定酶活力方法的反应时间改为 5 分钟, 以不同浓度的 D-木糖和 D-葡萄糖为底物, 测所得酮糖浓度. 用双倒数法作图, 求得以 D-木糖为底物的  $K_m$  和  $V_{max}$  值分别为 0.019mol 和 62.5 $\mu$ mol/min/mg(图 6a); 以 D-葡萄糖为底物,  $K_m$  值和  $V_{max}$  值分别为 0.53mol 和 95.2 $\mu$ mol/min/mg(图 6b), 该酶对 D-木糖的亲合性更高.

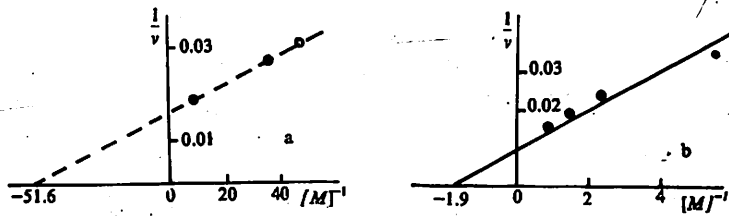


图 6 a 以 D-木糖为底物, b 以 D-葡萄糖为底物测定  $K_m$  与  $V_{max}$  值

### 3.4 酸碱度和温度对酶活力的影响

采用两种缓冲体系测定最适 pH 值. 在 pH6.0~9.0 范围内采用 0.05mol 巴比妥一盐酸缓冲液. 在 pH9.4~10.9 范围内采用 0.05mol 甘氨酸一氢氧化钠缓冲液. 分别以 D-葡萄糖和 D-木糖为底物, 在上述缓冲体系中, 测定不同 pH 值时的酶活力, 得出在 70℃ 反应温度下的最适 pH 值分别为 8.0 和 8.3(图 7). 类似地改变温度, 测定了 pH7.5 时酶活力随温度改变的曲线(图 8). 从图中可得, 最适温度在 70℃ 左右.

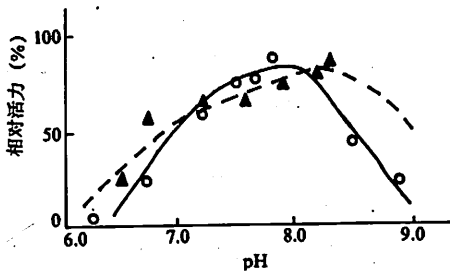


图 7 在 70℃ 下最适 pH 值的测定

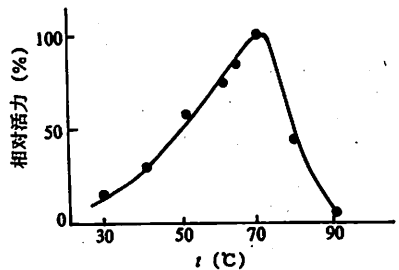


图 8 以 D-木糖为底物在 pH8 时最适温度的测定  
——D-木糖为底物    .....以 D-葡萄糖

### 3.5 金属离子的激活和抑制作用

表2列出了在测活系统中,以相同浓度的金属离子代替  $\text{Co}^{2+}$  后,得到的酶活力情况.底物为相同浓度的 D-木糖和 D-葡萄糖.

表2 金属离子对酶活力的影响

底物	空白	$\text{Co}^{2+}$	$\text{Mg}^{2+}$	$\text{Mn}^{2+}$	$\text{Al}^{3+}$	$\text{Ca}^{2+}$	$\text{K}^+$	$\text{Fe}^{2+}$	$\text{Ni}^{2+}$	$\text{Zn}^{2+}$	$\text{Ba}^{2+}$	EDTA
D-木糖	5.7%	100%	62.4%	71%	5%	0.6%	4.4%	2.4%	1.9%	3.1%	4.1%	0.8%
D-葡萄糖	10.7%	100%	54.4%	22.7%	2.6%	0%	0%	18.1%	0.6%	0%	8.6%	4.3%

由表2可见, $\text{Co}^{2+}$ 、 $\text{Mg}^{2+}$ 、 $\text{Mn}^{2+}$ 对该酶有较大的激活作用, $\text{Ca}^{2+}$ 则显示出强烈的抑制作用.

## 4 讨论

表3列出了链霉菌 M1033 菌株所产葡萄糖异构酶和其它一些报导过的同类酶的性质.从不同底物的  $K_m$  值可以得出,该酶本质上是木糖异构酶,与其它葡萄糖异构酶一样具有较高的最适温度和最适 pH 值,同样也需要二价金属离子作为激活剂.有关其它葡萄糖异构酶的性质,国外已有很多报导,Chen Wenpin 也曾作了较全面的综述<sup>[8]</sup>.

表3 各种菌株产葡萄糖异构酶性质比较

菌株	底物	$K_m(M)$	最适温度	最适 pH
Streptomyces M1033 链霉菌 M1033	D-木糖	0.019	70°C	8.3
	D-葡萄糖	0.53		
Streptomyces violaceoruber 紫色链霉菌变种	D-木糖	0.0035	80°C	7.5-9.5
	D-葡萄糖			
Alkalophilic bacillus No. KX-6 嗜碱的杆菌 No. KX-6	D-木糖	0.076	60°C	7-9
Streptomyces phaeochromogenes 暗色链霉菌	D-葡萄糖	0.25		
Streptomyces Sp S41-10 链霉菌 Sp. S 41-10	D-木糖		75°C	8.5
	D-葡萄糖			
streptomyces Sp. 链霉菌 Sp.	D-木糖	0.40	80°C	7.0-8.0
	D-葡萄糖			
Stravogriseus	D-木糖	0.078	70°C	7.5
	D-葡萄糖	0.249		
S. flavovivens FO 3197 黄色链霉菌 FO 3197	D-木糖	0.50	85°C	8.5
	D-葡萄糖			
S. phaeochromogenes SK 暗色链霉菌 SK	D-木糖	0.3	90°C	9.3-9.5
	D-葡萄糖			
S. phaeochromogenes NRRL, B-3559 暗色链霉菌 NRRL B-3559	D-木糖	0.25	80°C	8.0
	D-葡萄糖			
B. Stearothermophilus 枯草嗜热脂肪芽孢杆菌	D-葡萄糖		80°C	7.5-8.0
	D-木糖			
	D-核糖			
	D-阿拉伯糖			

虽然该酶有较高的热稳定性,但这必须以  $Mg^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Mn^{2+}$  离子的存在为前提. 因为它们对葡萄糖异构酶的构象有稳定和保护作用<sup>[9,10]</sup>,所以在分离纯化该酶的过程中要始终保持一定浓度的  $Co^{2+}$  和  $Mg^{2+}$ .

$Co^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Mn^{2+}$  等离子半径小于或等于  $0.8 \text{ \AA}$ , 有激活作用.  $Ca^{2+}$  离子半径大于  $0.8 \text{ \AA}$ . 离子半径越大,水合离子半径越小,越易和酶紧密结合,而金属离子和酶结合后,因活性部位外露少,底物不易和活性中心结合,则表现出酶活减少. 这或许是  $Ca^{2+}$  对该酶活产生抑制作用的原因所在. 又由于 D-葡萄糖比 D-木糖多一个碳原子,因此以 D-葡萄糖为底物时更不易进入该酶的活性部位,表现为该酶对 D-木糖有更高的亲和性. 以上结果支持了有关酶—金属离子—底物之间的三角关系的提法<sup>[1,2]</sup>. 显然这种关系的阐明对该酶作用机制的探讨是很重要的.

### 参 考 文 献

- [1] Chen Wenpin, *Process Biochem.*, 14 (1980), 30—35.
- [2] 贺家明等, *食品与发酵工业*, (1981), No. 1, 1—4.
- [3] Diche Z *et al.*, *J. Biol. Chem.*, 192, (1951), 583.
- [4] Lowry O H *et al.*, *J. Biol. Chem.*, 193(1951), 265.
- [5] Andrews P, *Biochem. J.*, 91 (1964), 222; 96 (1965), 395.
- [6] 孙册等, *凝聚素*, 科学出版社, 1986; 21.
- [7] *Laboratory Manual, LKB 2117 Multiphor I Electrophoresis System* (1986).
- [8] Chen Wenpin, *Process Biochem.*, 15 (1980), 36—41.
- [9] Callens M *et al.*, *Enzyme Microb. Technol.*, 8 (1986), 696—700.
- [10] Kasumi Takafumi *et al.*, *Agric. Biol. Chem.*, 46(1982), No. 1, 31—39.
- [11] Maitland Young *et al.*, *J. Biol. Chem.*, 250 (1975), 9021—9027.
- [12] Schray K J *et al.*, *J. Biol. Chem.*, 247 (1972), 2034—2037.

## Purification and Properties of D-glucose Isomerase From *Streptomyces* M1033

Huang Wanzhi Wang Chun Liu Jing Cui Tao  
Liu Xian'an Niu Liwen Wang Yuzhen Xu Xun

(*Department of Biology*)

### Abstract

D-Glucose Isomerase from *Streptomyces* M1033 is purified to electrophoretic homogeneity through ammonium sulfate fractionation, DEAE-sephadex A-50, and Sephadex G-150 column chromatography from the culture in which the cell debris are removed. The enzyme is made up of two identical subunits. Its molecular weight is approximately 91 000 as measured by gel filtration and pI is 4.3. The enzyme is proved not to be a glycoprotein. At about 70°C the enzyme retains optimum activity. At this temperature the pH optimum with respect to glucose and xylose are 8.0 and 8.3. The enzyme is most activated by  $\text{Co}^{2+}$  and  $\text{Mg}^{2+}$ . A further study shows that the effect of the same metal ion on the enzyme changes with respect to different substrates.

**Key words:** streptomyces M1033. D-glucose isomerase, D-xylose isomerase, metal ion binding

# Surface Roughness Measuring and Evaluating at Nanometer Scale for Precise Bearing Ball

Huang Wenhao      J. M. Gomez-Rodriguez      A. M. Baro<sup>+</sup>

*(University of Science and Technology of China)*

*(+ Depto. de Fisica de la Materia condensada, C- I Universidad Autonoma de Madris)*

## Abstract

The surface structure of a small bearing ball is measured by means of Atomic Force Microscopy (AFM) on nanometer scale. In order to evaluate the surface quality of this kind of three dimensional measurement, the following parameters are suggested:  $R_a$ ,  $R_t$ ,  $R_q$  and  $t_p$ . Some questions related to this choice are discussed in this paper.

**Key words:** measurement, bearing ball, precise surface, atomic force microscope, nanometer

## Introduction

Precision bearing balls play an important role in precision engineering. They are used in precision machines and instruments. The quality of these balls will affect the accuracy and the working life of these machines and instruments. People usually use interferometers and contact (stylus) instruments to measure the ball's surface roughness. The interferometer is non contact, but when the corrugation of the surface is less than  $0.05 \mu\text{m}$ , it is difficult to evaluate it because the interference fringes are almost straight lines. The stylus can get several parameters by means of a computer, but it is a contact method. The limit of this method mainly depends on the radius of the scanning tip. For example, the instrument Talystep has the minimum radius of  $0.1 \mu\text{m}$  [1]. Besides, it is almost impossible for these two methods to operate with small balls due to their reduced diameter ( $3\text{mm}$ ). Both methods are limited because they give line profiles.

Since Scanning Tunneling Microscope (STM) and Atomic Force Microscope (AFM) were

invented, they have shown great potential in the measurement of the surface structure on nanometer scale. They have been soon applied to precision engineering. N. Garcia et al. used STM to measure the surface roughness of a "0" class block gauge[2].

Here we report on the results we have obtained by using an AFM to measure the surface structure of a small bearing ball. We operated the AFM in the repulsive mode with a small force of  $<5 \times 10^{-8}$  N, which is more than two orders of magnitude lower than the force applied by the stylus instrument. AFM gives three-dimensional images and it can get nanometer resolution.

An important point is how to specify quantitatively the surface structure. For one dimensional measurement, there are international standards and various national standards. But for 3-dimensional measurement, there are no formal documents that can be used. Here we propose four parameters; the arithmetical mean deviation of the profiles  $R_a$ , the root-mean-square deviation of the surface  $R_q$ , the maximum height of the surface  $R_y$ , and bearing area ratio  $t_p$ .

### Experiments

We installed an AFM[3, 4] based on a polarized laser interferometer. A tungsten tip was glued onto a commercial silicon wafer. The tip was made by direct-current (dc) etching (3V) of 0.1 mm polycrystalline W wire. We measured the tips by Scanning Electron Microscopy (SEM). The radii of these tips were about 10 nm. The force constant of the cantilever was about 12N/m. The eigen frequency of 1.2kHz.

We obtained the precision bearing ball from the metrology laboratory of REGO Company in Spain. The diameter is 3mm.

Because the system was sensitive to optical, mechanical, air and thermal fluctuation, we designed our system with cylindrical symmetry structure. We used materials which had small thermal expansion. The optical parts were fixed directly on a granite plate, and a special box covered these parts and the microscope. This box could reduce optical, thermal and also the acoustic noise. The granite plate was suspended with soft springs. Finally we got an output of the signal sensitivity of  $20 \text{ mV}/\text{\AA}$ , the noise was about 5mV, and the thermal drift  $0.05 \text{ \AA}/\text{sec}$ .

Usually we use the repulsive force mode. The constant force is about  $5 \times 10^{-8}$ N. The scanning frequency is 1-5Hz. Here we show two images of different measuring range. Fig. 1 shows the three dimensional and top view representations of a  $3\mu\text{m} \times 3\mu\text{m}$  area. Fig. 2 shows the same data for size  $1\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$  taken on a different area of the same ball.

### Parameters of 3-dimensional profiles

The data obtained by AFM can be processed to give a 3-D representation of the surface. Although this representation can be sometimes self-evident, it is important to give quantitative information from the image. For that purpose and to give the non periodic character of the surface, we suggest that four



parameters be used: the arithmetical mean deviation  $R_a$ , the root-mean-square deviation  $R_q$ , the maximum height  $R_y$  and the profile bearing area ratio  $t_p$ . The reference plane is the least squares mean plane. We use the same terminologies and the same symbols as those in ISO 4287/1-1984 and ISO 468-1982, in order that people can understand and use them easily conveniently.

The arithmetical mean deviation  $R_a$  is defined as

$$R_a = \frac{1}{N_x} \cdot \frac{1}{N_y} \sum_i^{N_x} \sum_j^{N_y} |Z_{ij}| \quad (1)$$

Here  $N_x$ ; sampling points in X direction

$N_y$ ; sampling points in Y direction

$Z_{ij}$ ; Height with respect to the least squares mean plane

The root-mean-square value  $R_q$  is defined as

$$R_q = \left\{ \frac{1}{N_x} \cdot \frac{1}{N_y} \sum_i^{N_x} \sum_j^{N_y} Z_{ij}^2 \right\}^{1/2} \quad (2)$$

Here  $N_x, N_y, Z_{ij}$  are the same as in (1).

The maximum height  $R_y$  is defined as

$$R_y = R_p + R_n \quad (3)$$

Here  $R_p$  is the distance between the highest point of the profiles and the reference plane,  $R_n$  is the distance between the lowest point of the profiles and the reference plane.

The profile bearing area ratio  $t_p$  is defined as:

$$t_p = \frac{\eta_p}{S} \quad (4)$$

Here  $\eta_p$  is the sum of the section areas obtained by cutting the profile peaks with a plane parallel to the reference plane.  $S$  is the area of scanning. From this we can get the curve of the profile bearing area ratio representing the relationship between the value of the profile bearing area ratio and the section level.

In our experiment, in  $3\mu\text{m} \times 3\mu\text{m}$  area,  $R_a=4.1\text{nm}$ ,  $R_q=5.2\text{nm}$ ,  $R_y=34\text{nm}$ . The values for the  $1\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$  image are  $R_a=4.1\text{nm}$ ,  $R_q=4.9\text{nm}$ ;  $R_y=25\text{nm}$ . The curves of bearing area ratio are shown in Fig. 3.

## Discussions

From our experiment, it is clear that AFM is a potential tool to measure an ultra-precise surface. Not only can conductive sample be measured but also the non conductive one. Along with the development of science and technology, the requirements of specifying 3-dimensional high quality surface with nanometer scale are placed on the order of the day. The standardization of the parameters and values for the specification of 3-dimensional surface is absolutely necessary.

From the point of view of metrology, the important and more difficult thing is to calibrate the instrument and to estimate the uncertainty of the measuring method. There is a lot of work to be done.

Some people [5] suggest using diffraction grating to calibrate  $\mu\text{m}$  scale range and using lattice constant to calibrate nanometer scale image. This is feasible at the present time. Maybe it is necessary to find some standard material which is very stable and suitable for calibrating the 3-dimensional measurements.

In this paper, we have not mentioned the terminology "sampling area". It is not the question that the values of  $R_a$ ,  $R_q$ ,  $R_y$  and  $t_p$  are not dependent on the "sampling area". In fact, like the "sampling length" in ISO 4287/1-1984 and ISO 468-1982, this is very important. The question is that because we performed few experiments we can not determine how big the "sampling area" is reasonable. At the moment, we suggest considering the "sampling area" as being equal to the scanning area. So it is clear that when someone mentions the value of  $R_a$ ,  $R_q$ ,  $R_y$  or  $t_p$  of 3-dimensional profiles, he must point out the value of scanning area.

The authors wish to express their sincere thanks to C. Schenberger and S. Alvarado from Research Center in Zuerich for their advice. Financial support has been obtained from CIC,T under Contract MAT90-0352-E.

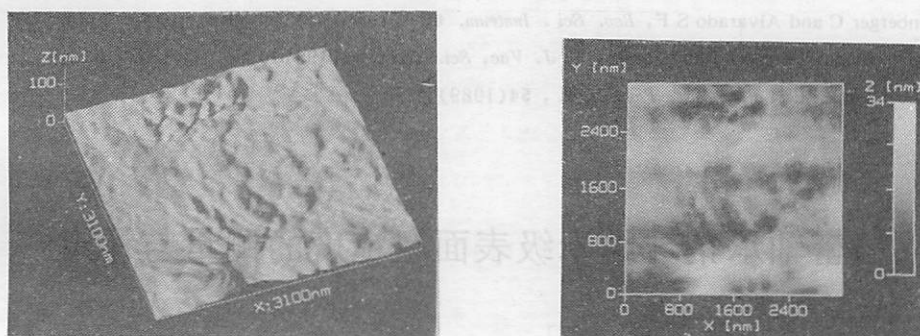


Fig 1a shows a 3-dimensional representation of a bearing ball of 3mm diameter. Fig 1b is the top view.

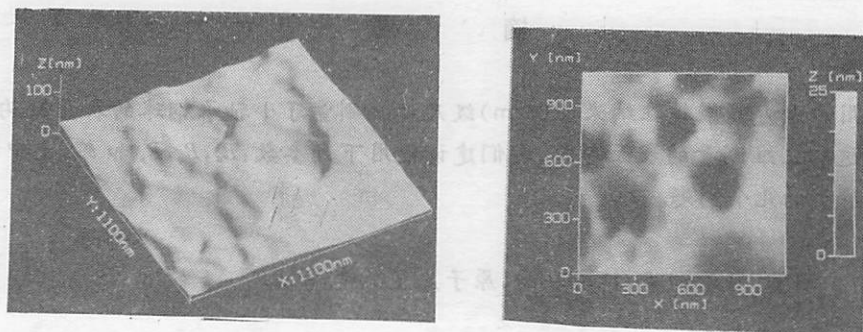


Fig 2a and 2b show a smaller area of a different place in the same ball as in Fig 1.

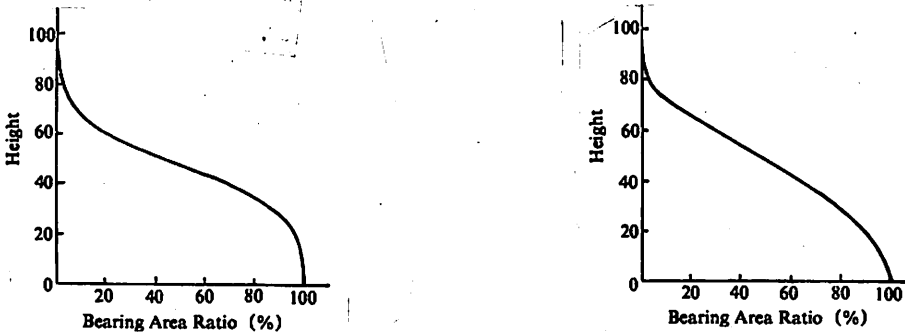


Fig 3a and 3b show the curves of bearing area ratio corresponding respectively to the regions depicted in Figs 1 and 2.

#### References

- [1] Talystep operational instructions. Rank Taylor Hobson Ltd. England.
- [2] Garcia N, Baro A M, Miranda R, Rohrer H, *et al.*, *Metrologia*, 21(1985), 566.
- [3] Schnenberger C and Alvarado S F, *Rev. Sci. Instrum.* 60, (1989), 3131.
- [4] Huang WenHao, Baro A M and Saenz J J, *J. Vac, Sci. Tech*, B9(1991), No: 2, 1323-1328.
- [5] Li Y Z, Vazquez L *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 54(1989), 15.

## 精密轴承钢球纳米级表面粗糙度的测量与评定

黄文浩

J. M. 郭美思 A. M. 巴罗

(中国科学技术大学)

(马德里自治大学)

### 摘 要

利用原子力显微镜在纳米( $10^{-9}$ m)级尺度上测量了小轴承钢球的表面结构。为了评定这种三维测量的表面形貌,我们建议使用下列参数: $R_a$ ,  $R_q$ ,  $R_z$  和  $I$ 。文中讨论了与此有关的几个问题。

关键词: 测量, 轴承钢球, 精密表面, 原子力显微镜, 纳米

# 三维形体消隐和相贯线的一种新算法

朱仁芝 太美花 邓益民

(精密机械与精密仪器系)

## 摘 要

利用棱线的图示规律和凸体、凹体的遮挡特性,给出消隐和相贯线的一种新算法. 主要技术途径为对体的棱和面进行分类处理,引入了边界线、准轮廓线和轮廓线等概念,使得对凹体可以作与凸体相同的消隐处理,而无需将其分成若干个凸体. 引入了“广义面”的概念,将体对棱线的遮挡转化为“广义面”对棱线的遮挡. 同时提出了判断相贯线“真伪性”的四条原则和寻找“有效”交点的方法,从而大大降低了算法的时间复杂度,提高了计算精度和可靠性.

关键词: 凸体,凹体,消隐,相贯线,计算机绘图

中图法分类号: TP391.72

## 1 引言

消隐问题一直是计算机图形学的一个难点,近年来人们研究出各种消隐算法. 但是最适合三维形体的消隐算法,仍然是著名的 Roberts 算法<sup>[1]</sup>,可是它只能解决凸体的消隐问题,而且时间复杂度高,约为  $O(N^3)$  ( $N$  为形体的棱边数),凹体必须分割为若干个凸体处理,则更增加了时间复杂度,另外凹体形状多种多样,其中有些分割起来极为不便. 文献[2]中提出的凹体消隐算法,其时空复杂度均较高,不便于微机上实现,使其应用受到一定的限制.

本文提出了不同于以往算法的一些新概念和方法,形成了一种新的消隐算法,可以对任何形体(包括凸体和凹体)直接实现消隐和相贯处理,同时采用了图象空间和对象空间相结合的方式,各取其长,使时间复杂度降为  $N$  的线性阶,从而,可以很方便地在微机上得以实现.

## 2 算法基础

本算法的理论基础,主要包括棱线的表示法及其分类;边界线集、准轮廓线集、轮廓线集的定义及其求法;相贯线“真伪性”的判断等三个方面的内容.

### 2.1 棱线、面的表示法及其分类

#### 2.1.1 棱线的表示

棱线的两端点记为  $P_1(x_1, y_1, z_1), P_2(x_2, y_2, z_2)$ .

设  $P(x, y, z)$  为其上一动点,采用参数方程表示

$$\begin{aligned} x &= x_1 + (x_2 - x_1) \cdot t \\ y &= y_1 + (y_2 - y_1) \cdot t \\ z &= z_1 + (z_2 - z_1) \cdot t \end{aligned} \quad (0.0 \leq t \leq 1.0)$$

#### 2.1.2 面的表示

平面用方程  $Ax + By + Cz + D = 0$  来表示,外法线为  $n(A, B, C)$ ,为了减少浮点数的近似运算引起的不稳定性,把法向矢量单位化.

$$\text{令 } K = \sqrt{A^2 + B^2 + C^2}$$

$$\text{则 } A' = A/K, \quad B' = B/K, \quad C' = C/K, \quad D' = D/K$$

于是,将平面方程改写成为

$$A'x + B'y + C'z + D' = 0$$

#### 2.1.3 面和棱线的分类

##### 1) 面分为两类

如图 1 所示:  $v$  为投影方向,  $n$  为外法线方向.

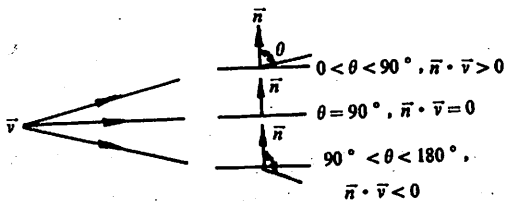


图 1 面的外法线与投影方向间的关系

若  $n \cdot v < 0$ ,则该面完全可见或部分可见,称之为 F-face 型面.

若  $n \cdot v \geq 0$ ,则该面完全不可见,称之为 B-face 型面.

##### 2) 棱线三类

第一类:若棱线的两邻面均为 B-face 型面,则该棱线完全不可见,称之为 BB-line 型线.

第二类:若棱线的两邻面均为 F-face 型面,则该棱线完全可见或部分可见,称之为 FF-line 型线.

第三类:若棱线为 B-face 与 F-face 型面的交线,称之为 BF-line 型线.

### 2.2 边界线集、准轮廓线集、轮廓线集

#### 2.2.1 定义

边界线集——完全可见或部分可见的 BF-line 型线的集合.

准轮廓线集——边界线可见部分之集合.

轮廓线集——把一个形体投影到二维平面后,“最内”和“最外”边线的集合.

三者之间的关系是：

轮廓线集  $\subseteq$  准轮廓线集  $\subseteq$  边界线集

对于凸体很简单，三者均为物体上 BF-line 型线的集合

对于凹体情况较为复杂，如图 2 所示：

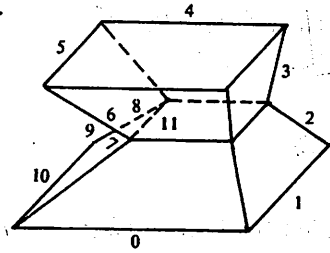


图 2 边界线、准轮廓线和轮廓线的关系

BF-line 线集：[0、1、2、3、4、5、6-7、8-9、10、

11]

边界线集：[0、1、2、3、4、5、6-7、8-9、10]

准轮廓线集：[0、1、2、3、4、5、6-7、9、10]

轮廓线集：[0、1、2、3、4、5、6、9、10]

### 2.2.2 求法

轮廓线经四步筛选求得：

1. 根据棱线两邻面的属性，选出体的 BF-line 型线。
2. 剔除上一步中的完全不可见的 BF-line 型线。如图 2 中的 11。
3. 判断每一条边界线的可见性，求出其可见部分，即求出了体的准轮廓线集。
4. 从准轮廓线集中筛选出轮廓线集。组成轮廓线的线段，一定构成一个或多个回路。如图 3 中粗线所示。

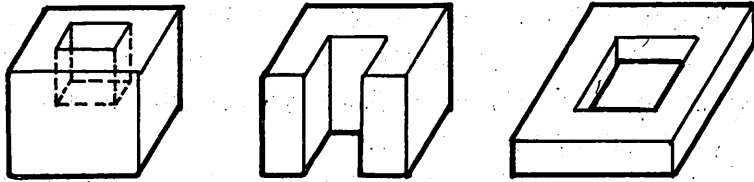


图 3 轮廓线回路

因为轮廓线集中，每一个回路的相邻两条边必有交点或重重点，所以可以从准轮廓线集中的某一条开始，一根一根地、首尾相接地找出所有的回路来。

### 2.3 相贯线“真伪性”的判断

相贯线是物体两个表面的共有线，两个相贯点决定一条相贯线，但并非任意两个相贯点的连线都是相贯线，所以需进行“真伪性”判断。

真相贯线应符合下面四条原则：

1. 两个相贯点必同属于两个体。
2. 决定一个相贯点的三个面参数中，必有两个也是另一相贯点的面参数，且分属于两个体。
3. 上面所说的两个面都属于 F-face 型面。
4. 当相贯的两个体中，有一个或两个都是凹体时，将会交出大于 2 的偶数个相贯点，这些相贯点中，任意两个都满足 1~3 的原则，但并不是任意两个相贯点连线都是相贯线，这时需把那些相贯点按某一坐标作增序或减序

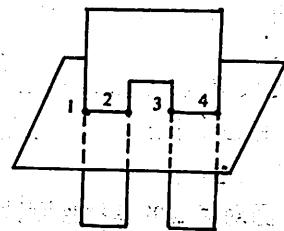


图 4 相贯线的真伪性判断

排列,并予以编号  $1, 2, \dots, 2n$ , 则相贯线为  $1-2, 3-4, \dots, (2n-1)-2n$ . 如图 4 中 1 与 2 及 3 与 4 的连线均属于真相贯线.

根据此原则,可以成组成串地把“伪相贯线”排除掉,然后再对剩下的少量的真相贯线进行遮挡性判断.

### 3 基本算法

三维形体的消隐,实际上是一个体对一条线(指另一个体上的棱线)遮挡性判断的问题. 本算法的最大特点是充分利用了凸体、凹体的遮挡特性及棱线的图示规律,引入了边界线、准轮廓线及轮廓线等概念,尽可能地避免了没有必要的繁琐计算,使时间复杂度降为  $N$  的线性阶( $N$  为棱边数),计算精度和可靠性得到了显著提高.

#### 3.1 棱线的图示规律

1) 一条棱线上可见与不可见部分的分界点,必定是该棱线与另一条可见棱线的“交点”(投影交点),或是“有效”交点.

2) 每一小段的可见性,可任取其上一点(一般取中点较为方便),若该点可见,则小段可见,反之不可见.

为了求出可见棱的有效分界点,需根据不同的情况,选择不同属性的可见棱:

判断自隐藏线时,可见棱应从边界线集中选取;判断一个形体被另一个形体遮挡的不可见部分时,如果该形体的最大  $z$  值小于另一形体(称为检查体)的最小  $z$  值,则可见棱从检查体的轮廓线集中选取,否则应从其准轮廓线集中选取.

相贯点既可以是一条棱与可见面的交点,也可以是与不可见面的交点,但后者经消隐处理后要淘汰掉,所以没有要求出,也就是说,我们只需求出“有效”的真正改变各段可见属性的分界点. 无论是凹体还是凸体各棱的可见与不可见均呈相间排列的规律,故没有必要对每一小段进行可见性测试,只要判断第一段的可见性,其它各段的可见性便可确定了.

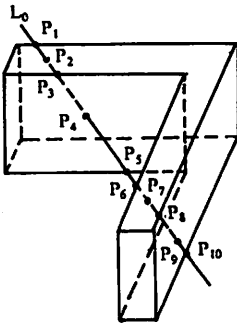


图 5 体对棱线遮挡性判断

现举一个简单的例子,如图 5 所示,判断直线  $L_0$  的可见性. 文献[2]中需求出  $P_1 \sim P_{10}$  十个交点,连同  $L_0$  的首尾两个点把  $L_0$  分成 11 段,分别判断其可见性. 而本算法只需求出  $P_1, P_4, P_5, P_9$  四个交点,然后判断第一段的可见性即可. 因为  $P_2$  和  $P_7$  是  $L_0$  与 B-face 型面的交点,

所以是无效交点;  $P_3$  和  $P_6$  是  $L_0$  与 FF-line 型线的交点,被它们分成的相邻两段,可见性总是一致的,没有要求出;  $P_8$  和  $P_{10}$  是重影点,且  $L_0$  上的点离观察点较近,不改变棱的可见属性,故不是有效交点.

#### 3.2 面对棱线的遮挡性测试

这里,我们引入了“广义面”的概念. “广义面”既指平面多边形,也指一系列棱线的集合,如边界线集、准轮廓线集、轮廓线集等. 于是,一个体对一条棱线的遮挡性问题,转化为一个“广义面”对一条棱线的遮挡性问题. 如图 6 所示,判断体对棱线  $L$  的遮挡,以往的作法是判断

体的每一个可见面对  $L$  的遮挡,引入“广义面”后,只需判断“广义面”对棱线的遮挡(这里指图中用粗实线所示的轮廓线集)即可.这在很大程度上加快了计算速度.

### 3.2.1 求棱线的“有效”分界点

分界点分为两类,一是“有效”的相贯点,二是棱与“广义面”的“有效”重影点.

#### 1. 求“有效”相贯点

当棱线在检查体的包围盒内与检查体相贯时,应求出相贯点的  $t$  值.

设棱线  $L$  两端点为  $P_1(x_1, y_1, z_1), P_2(x_2, y_2, z_2)$

可见面方程为  $Ax + By + Cz + D = 0$

令  $f(x, y, z) = Ax + By + Cz + D$

如果  $f(x_1, y_1, z_1) \cdot f(x_2, y_2, z_2) \geq 0$

则  $P_1, P_2$  在平面的同一侧,不与平面相交,否则有交点:

$$t = f(x_1, y_1, z_1) / [f(x_2, y_2, z_2) - f(x_1, y_1, z_1)]$$

如果  $0 < t \leq 1.0$ ,则该交点是棱线上的点,但不一定是有限平面片上的点,只有交点包含在面内,才是有效的,所以需进行包含性测试.测试的方法参见文献[2],但当遇到如图 7 所示的辅助射线  $L$  过端点  $P$  时,[2]中的方法就不适用了,为此,我们采用了一个小技巧,将  $L$  绕  $P_0$  旋转一个很小的角度,到  $L'$  的位置,此时  $L'$  如图 7(a)所示交出两个交点,图 7(b)所示交出一个点,即解决了问题.

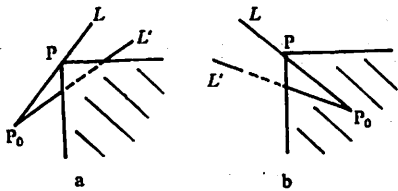


图 7 包含性测试

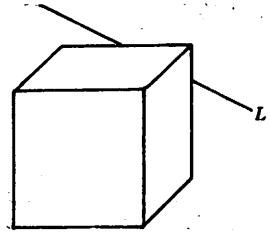


图 6 广义面对棱线的遮挡

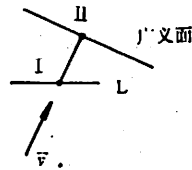


图 8 有效重影点

#### 2. 求棱线与“广义面”的“有效”重影点.

这里的“有效”重影点,是指棱线  $L$  上的点  $I$  较“广义面”上的点  $I$  离观点者更近的的重影点,如图 8 所示.图中  $V$  为投影方向.

### 3.2.2 判断各段的可见性

这里也要分两种情况来讨论:一是检查体为凸体的情况,二是检查体为凹体的情况.

1. 当检查体为凸体时,一条直线贯穿凸体最多只有两个相贯点,此时体上无可见棱遮挡直线,如图 9 中  $L_1$ ;一条直线被体上的可见棱遮挡,最多也只能有两个遮挡点,如  $L_3$ ,总之凸体与直线的位置关系,如图 9 共有 7 种情况,即  $t_i$  值最多也只能有四个(包括两个端点  $t_0=0.0$  和  $t_4=1.0$ ).

当  $t_i$  有两个值的时候, $L$  或完全可见,或完全不可见,只要知道  $t_i=0.5$  点的可见性即可.



若该点可见,则  $L$  可见,反之,不可见.

当  $t_i$  有三个值时, $L$  被分成两段,若其中一段可见,另一段必不可见,只需判断一段的可见性即可.

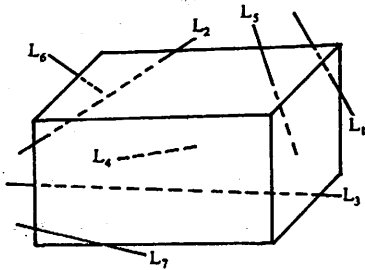


图 9 凸体与直线的位置关系

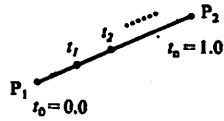


图 10 小分段的可见性

当  $t_i$  有四个值时, $L$  被分成三段,中间一段一定不可见,其余两段均可见,不必再进行可见性测试.

## 2. 当检查体为凹体时的情况

如前所述,当棱线被凹体遮挡时,棱线的可见性是按可见与不可见相间的规律排列的,所以只需判断第一段的可见性.

取中点:  $P_{mid} = P_1 + (P_2 - P_1) \cdot (t_1 + t_0)/2$ , 对于点  $(x_{mid}, y_{mid})$  实施点的包含性测试. 当点  $(x_{mid}, y_{mid})$  被包含在面内,且  $z_{mid} < -(D + Ax_{mid} + By_{mid})/C$  时,中点被平面所遮挡,则  $(t_0, t_1)$  段不可见,反之可见. 如图 10 所示.

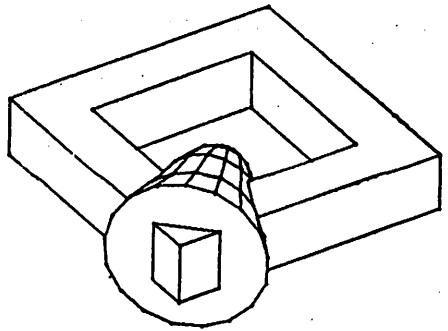
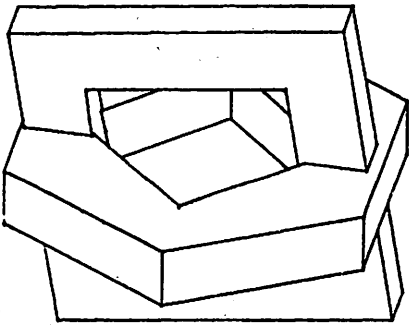
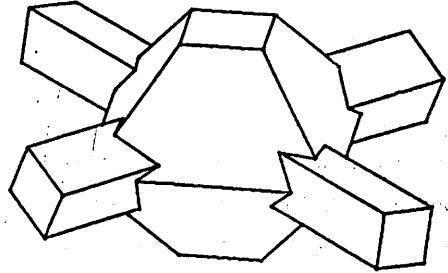
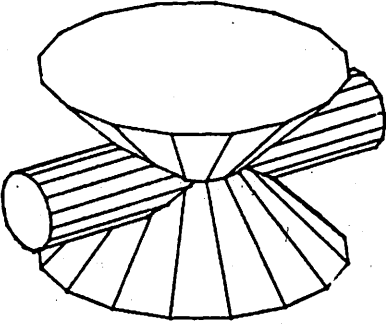
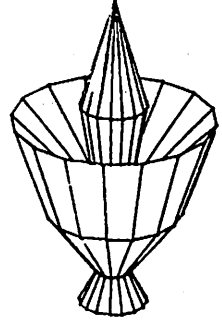
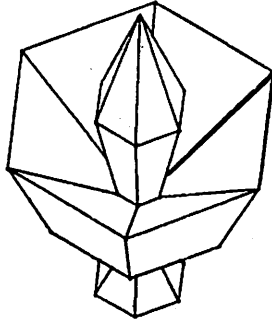
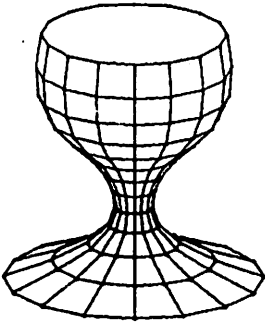
## 4 小结

本算法具有速度快、精度高、可靠性好的特点. 按本算法设计的 ZRZ-TMH 绘图软件具有以下功能:

1. 可适用于任意多个、任意形状物体的相贯和消隐处理. (见附图).
2. 对编写的初始化模块,只要输入少量信息,就可以自动生成本算法所需要的三维形体数据.
3. 为了提高输出图形的质量,便于控制回转体母线的形状,设计了曲线拟合模块及其与 ZRZ-TMH 的接口,扩展了功能.

## 参 考 文 献

- [1] D. F. 罗杰斯[美]著,梁友栋等译,计算机图形学的算法基础,科学出版社,北京,1987,234~273.
- [2] 孙家广、许隆文,计算机图形学,清华大学出版社,北京,1986,221~226.
- [3] 王来生主编,计算机图形处理技术,西安交通大学出版社,西安,1988,86.



附图

## A New Algorithm for Removing Hidden Lines and Obtaining Intersections of 3-D Objects

Zhu Renzhi Tai Meihua Deng Yimin

*(Department of Precision Machinery and  
Precision instrumentation)*

### Abstract

On the basis of the display regularities of the object edges and the hiding properties of convex and concave volumes, a new algorithm for removing hidden lines and obtaining intersections of 3-D objects is put forward. The main technical points are as follows: classifying the edges and surfaces of the objects; introducing the concepts of edge, boundary, quasi-outline and outline so that the hidden lines removing of a concave volume can be dealt with in the same way as that in the case of a convex one without dividing it into several convex ones; using the concept of "generalized surface" to change the hiding of edges by the volumes to the hiding of edges by generalized surfaces; giving four principles for judging the validity of the obtained intersections and the method for searching for the "efficient" intersecting points. All these points have greatly reduced the time complexity of the algorithm and also improved the calculating precision and reliability.

**Key words:** convex, concave, hidden lines removing, intersection, computer graphics

# 关于酉群上插值问题的一些讨论\*

郑学安

(安徽大学)

## 摘 要

通过对酉群上插值问题的分析,表明了酉群上,只能主要讨论酉群上的多项式插值等问题,而不适宜讨论酉群上的极小问题.

关键词: 酉群,插值,调和分析

中图法分类号: O174.42

AMS Subject Classifications (1991): 43A.

在[1]中,龚昇研究了酉群及一般的紧致拓扑群上的逼近理论,并得到了紧致拓扑群上  $Lip \alpha$  函数类用表示的多项式逼近的逼近阶. 作者认为,这一研究开创了我国紧致拓扑群上函数逼近论的研究工作. 其中所建立的基本思想、概念和基本方法,一直指导着国内在酉群、典型群及紧致李群上逼近论问题的研究,如[2],[3],[4].

文[1]的研究当时在国际上同样地处于领先地位,国外在七十年代才出现了一般紧致李群上逼近论问题的若干研究结果.

作为文[1]的一个副产品,龚昇顺便提出了酉群上的插值问题可如何提,并顺便给出了一个插值多项式的具体的明显的表达式. 尽管它不是该文的主要内容,它同样给酉群上的插值问题的研究指明了方向,给出了具体构造插值多项式的一个基本方法.

人们也曾试图将 Bergman 在[5]中提出的极小问题及其形形色色的推广(如[6],[7])在酉群上加以推广,即将所谓的“极小插值”问题在酉群上加以推广,在单复变与多复变有界域上,解上述极小插值问题的根本方法,就是 Bergman 在[5]中采用的 Lagrange 待定乘数法,用之来求相对极值. 而极小插值问题有解的根本原因,就在于有界域上存在着各种核函数,例如

1991年10月3日收到.

\*国家自然科学基金资助课题

Bergman 核、Cauchy 核等。

人们的研究表明,在酉群紧致李群紧致齐性空间上,提出与上述有界域上相似的极小插值问题是没有意义的,因为它或者无解,或者只有平凡解。

《中国科学技术大学学报》第 21 卷第 3 期(1991)发表了吴汉臣同志撰写的“关于酉群上的插值问题”一文,讨论的恰是我们上面提到的有界域上极小插值问题在酉群上的一种推广。该文提出讨论这一极小插值问题本身是没有多少意义的,且论证是错误的,结论也是不成立的。

## 1 关于酉群上的多项式插值

酉群及一般紧致李群上的插值问题应如何提,文[1]给出了明确的答复,文[1]指出,通常这一提法应是:

设  $u(U)$  是  $n$  阶酉群  $U_n$  上的一个连续函数,  $\{U_{(k)}, k=1, 2, \dots, N\}$  是  $U_n$  中的一组点,如存在酉群表示环中的一个  $N$  阶多项式  $P_N(U)$ , 使在上述点上成立

$$P_N(U_{(k)}) = u(U_{(k)}), \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

则  $P_N(U)$  就是  $u(U)$  关于给定定点组  $\{U_{(k)}\}$  的一个  $N$  阶插值多项式。

进一步,当  $u(U)$  可微时,还可要求  $P_N(U)$  在给定点处的某些偏导数等于  $u(U)$  在对应点处的偏导数。

在酉群上的插值问题,首先要具体确定插值多项式,给出它的具体的明显的表达式,这样才有可能对插值问题作进一步的研究。为此,文[1]给出了一个具体的插值多项式作为明显的例子,并指出还可循着文[1]中构造插值多项式的基本思路和方法,构造出形形色色的有意义的插值多项式。

正是沿着文[1]的基本思路与方法,何建勋在硕士学位论文中研究了酉群  $U_n$  与旋转群  $SO(n)$  上插值三角多项式的一致收敛性,取得了一些有意义的结果,汪继文则沿着文[1]的思路与方法构造了酉群上的 Lagrange 插值多项式并研究了它的一致收敛性,获得了有意义的结果。

沿着这一方向前进,酉群上、紧致李群上、紧致齐性空间上尚有许多的插值问题须加以研究和解决,而文[1]则提供了解决这些问题的基本思路与方法。

## 2 关于酉群上的极小插值问题

前面我们已指出,在酉群上提出与有界域上类似的极小插值问题,则或者无解,或者只有平凡解,因而是无意义的。这里,我们对酉群上的一个具体的极小插值问题加以讨论与说明。为使读者很容易明白为什么这一问题无意义,我们以最简单的酉群即单位圆周为例,按照 Bergman 的方法加以讨论,使读者看出问题所在。

首先我们叙述酉群上的一种极小插值问题如下(我们称之为问题 I):

设  $\mathcal{L}^2(U_n)$  是酉群上解析且平方可积函数类,  $U_{(k)}, k=1, 2, \dots, l$  是酉群上的一组点列,  $W_{k,h}, h=0, 1, \dots, m, k=1, 2, \dots, l$  表示一组复数。对  $Q(U) \in \mathcal{L}^2(U_n)$ , 求一个  $f(U) \in \mathcal{L}^2(U_n)$ , 使它满足条件

$$f^{(h)}(U_{(k)}) = W_{k,h}, \quad h = 0, 1, 2, \dots, m, \quad k=1, 2, \dots, l \quad (2)$$

且使酉群  $U$  上的积分

$$\int_{U_1} |Q(U) - f(U)|^2 \bar{U} \tag{3}$$

取得最小值.

应该说明,上述提法有很多不准确之处,但我们撇开这些细节问题,来考虑上述问题的解.

首先说明一下上面的记号. 这里  $\mathcal{L}^2(U_1)$  的完备正规正交函数系,是由第一类典型域  $R_r(n \times n)$  上解析且平方可积函数类的完备正规正交函数系在特征流形  $U_1$  上的限制所生成的. 它是酉群上平方可积函数空间的由不可约酉表示的矩阵元产生的完备正规正交函数系族的子族. 而  $f^{(k)}(U)$  表示  $f$  的某个  $k$  阶偏导数,这些偏导数是用左不变向量场求导产生的.

用  $\{\psi_p(U)\}$  表示  $\mathcal{L}^2(U_1)$  的完备正规正交函数系,并将之排列一列为  $\{\psi_p(U), p=1, 2, \dots\}$ , 则有  $f \in \mathcal{L}^2(U_1)$  时

$$\begin{aligned} f(U) &= \sum_{p=1}^{\infty} a_p \psi_p(U), \quad \sum_{p=1}^{\infty} |a_p|^2 < +\infty \\ a_p &= \int_{U_1} f(U) \overline{\psi_p(U)} \bar{U} \end{aligned} \tag{4}$$

而  $Q(U) \in \mathcal{L}^2(U_1)$ , 则有

$$Q(U) = \sum_{p=1}^{\infty} b_p \psi_p(U), \quad b_p = \int_{U_1} Q(U) \overline{\psi_p(U)} \bar{U} \tag{5}$$

我们用  $U_1$  即单位圆周来讨论问题 I, 这时  $\{\psi_p(U), p=1, 2, \dots\} = \{e^{in\theta}, n=0, 1, 2, \dots\}$ , (2) 式变成

$$W_{kk} = f^{(k)}(U_k) = \sum_{p=1}^{\infty} a_p \psi_p^{(k)}(U_k) = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{a}_n (in)^k e^{in\theta} \tag{2'}$$

若问题 I 的解  $f$  存在,我们可以按 Bergman 在 [5] 中采用的 Lagrange 待定乘法法来求解,即考虑

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |Q(\theta) - f(\theta)|^2 d\theta - \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^l \lambda_{kl} (f^{(k)}(\theta_k) - W_{kl}) \\ &\quad - \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^l \overline{\lambda_{kl}} (\overline{f^{(l)}(\theta_k)} - \overline{W_{kl}}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |\tilde{b}_n|^2 + \sum_{n=0}^{\infty} |\tilde{a}_n|^2 - \sum_{n=0}^{\infty} (\tilde{a}_n \bar{\tilde{b}}_n + \tilde{b}_n \bar{\tilde{a}}_n) \\ &\quad - \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^l \lambda_{kl} \left( \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{a}_n (in)^k e^{in\theta_k} - W_{kl} \right) \\ &\quad - \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^l \overline{\lambda_{kl}} \left( \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{a}_n (-in)^l e^{-in\theta_k} - \overline{W_{kl}} \right) \end{aligned} \tag{6}$$

这里  $f(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{a}_n e^{in\theta}$ ,  $Q(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{b}_n e^{in\theta}$ . 按 Bergman 方法对  $\tilde{a}$  求导并令其等于 0 可得

$$\tilde{a}_n = \tilde{b}_n + \sum_{k=0}^m \sum_{l=1}^l \overline{\lambda_{kl}} (-in)^l e^{-in\theta_k} \tag{7}$$

若问题 I 的解  $f = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{a}_n e^{in\theta}$  存在, 则  $\tilde{a}_n$  必适合 (7) 式. 再由  $\sum_{n=0}^{\infty} |\tilde{a}_n|^2 < +\infty, \sum_{n=0}^{\infty} |\tilde{b}_n|^2 < +\infty,$  即可得

$$\sum_{n=0}^{\infty} |\tilde{a}_n - \tilde{b}_n|^2 < +\infty \tag{8}$$

由 (7) 式即得到

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left| \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^l \lambda_{kl} (in)^k e^{in\theta_k} \right|^2 < +\infty \tag{9}$$

(9) 式收敛的必要条件是

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^l \lambda_{kl} (in)^k e^{in\theta_k} = 0 \tag{10}$$

利用问题 I 的解  $f$  存在时  $\lambda_{kl}$  的有界性可得

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (in)^{-n} \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^l \lambda_{kl} (in)^k e^{in\theta_k} = 0 \tag{11}$$

即得

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^l \lambda_{nk} e^{in\theta_k} = 0 \tag{12}$$

取  $n = n_0, n_0 + 1, \dots, n_0 + l - 1,$  并令  $n_0 \rightarrow \infty,$  得

$$\lim_{n_0 \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} e^{i(l-1)\theta_1} & \dots & e^{i(l-1)\theta_l} \\ \dots & \dots & \dots \\ e^{i\theta_1} & \dots & e^{i\theta_l} \\ 1, & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{n_0 l} e^{in_0 \theta_1} \\ \vdots \\ \lambda_{n_0 l} e^{in_0 \theta_l} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{13}$$

因  $\{e^{i\theta_k}\}$  是单位圆周上不同的点, (12) 式左边的矩阵非奇异, 这就得到

$$\lim_{n_0 \rightarrow \infty} e^{in_0 \theta_k} \lambda_{n_0 k} = 0, k = 1, 2, \dots, l \tag{14}$$

即  $\lambda_{nk} = 0, k = 1, 2, \dots, l.$  将之代入 (10) 中, 再作与 (11)~(14) 相似的讨论即得

$$\lambda_{hk} = 0, \quad h = 0, 1, \dots, m, \quad k = 1, 2, \dots, l. \tag{15}$$

将 (15) 式代入 (7) 式, 得到

$$\tilde{a}_n = \tilde{b}_n, \quad n = 0, 1, \dots \tag{16}$$

所以, 若  $W_{nk} = Q^{(k)}(\theta_k),$  则可得  $f(\theta) = Q(\theta),$  问题 I 有平凡解. 若  $W_{nk} \neq Q^{(k)}(\theta_k),$  则 (16) 式与 (2)' 矛盾问题 I 无解. 因此在  $U_1$  上, 问题 I 的提出就失去了意义.

在一般酉群上情况也是如此, 这里不赘述了.

参 考 文 献

[1] 龚昇, 数学学报, 13(1963), 323-331.  
 [2] 龚昇、李世雄、郑学安, Harmonic Analysis on classical Groups, Proceedings of the Analysis Conference, Singapore, North-Holland, 1988.  
 [3] 郑学安、许增福、赵和生, 数学进展, 1(1987), NO. 16, 61-66.  
 [4] 郑学安、赵和生、许增福, 数学进展, 2(1990), No. 19, 199-203.  
 [5] Bergman, S 著, 龚昇、陈希儒译, 核函数和共形映照, 科学出版社, 北京, 1985; 25~31.

- [6] Mortin W J, *Trans. Amer. Math. Soc.*, 48(1940), 350-358.  
[7] 叶芳草, 厦门大学学报, 1(1960), 53-59.

## A Discussion on Interpolations on Unitary Groups

Zheng Xuean

(Anhui University)

### Abstract

In this paper, we discuss some problems of interpolations on unitary groups, and find that we must study interpolations by polynomials on unitary groups.

**Key words:** unitary groups, interpolation, harmonic analysis



# 内参型非协调元位移试解完备性的研究\*

焦兆平 吴长春 黄茂光

(合肥工业大学)

(中国科学技术大学)

## 摘 要

本文提出在非协调等参位移元的研究中应该注意到总位移函数在直角坐标下的完备性. 根据这一思想, 文中针对弹性力学平面问题建立了新的非协调等参位移元模型系列. 良好的数值实验结果表明了这一研究思想的合理性.

关键词: 等参非协调元, 直角坐标, 试解完备性

中图法分类号: O343

## 1 引言

由于双线性位移场的四边形平面等参协调元( $Q_4$ 元)简单可靠、几何适应性好以及在自由度相同的情况下比常应变三角形位移元具有更高的计算精度等优点, 在工程计算中得到广泛运用. 但是在模拟单元弯曲变形时, 由于“寄生剪切”效应而使数值计算结果遭到严重破坏<sup>[1]</sup>. 1973年, Wilson等人<sup>[2]</sup>提出在 $Q_4$ 元的位移模式中增加内部二次位移( $Q_6$ 元), 这一措施有效地改善了单元模拟弯曲变形的能力. 但另一方面, 加入内位移后的单元不再是协调的, 对于非平行四边形单元剖分, 这种不协调性使得 $Q_6$ 元不能通过分片检验. 1976年, Taylor等人<sup>[3]</sup>提出一种治疗 $Q_6$ 元的方法, 由此得到的修正元( $Q_{M6}$ 元)可以通过分片检验, 同时保留下 $Q_6$ 元的高精度特点. Taylor的方法是在生成单元刚阵时对单刚的某些内容采用修正的数值积分格式, 以达到通过分片检验的目的. 近年来, 吴等<sup>[4,5]</sup>提出非协调元的能量相容条件, 并给出一种生成非协调位移函数的虚参数法. 由此导出的非协调元不需要采用修正的数值积分格式, 不破坏位移函数的完备性, 可以通过分片检验. 这种标准化的生成非协调位移场的方法对于将上

1991年9月29日收到.

\*本工作在合肥工业大学科研基金及国家教委博士点基金支持下完成.

述增加非协调内部位移场的方法推广至其它类型的单元以及运用于非线性有限元分析提供了方便和可能性<sup>[6-8]</sup>。

Wilson 元的出现,极大地刺激了有限元方法的研究. 近二十年来,许多力学工作者都致力于建立具有高的计算精度、能够通过分片检验的高效可靠的非协调元模型,并努力从各个不同角度去探讨非协调元的机理以及非协调位移元与杂交/混合有限元的内在联系,已经取得很多重要成果. 但是我们注意到,以往的等参非协调元的研究中,都是在自然坐标下考虑总位移场的完备性来确定非协调位移场的. 当单元歪斜时,一个在自然坐标下具有完备性的位移场在直角坐标下却不再是完备的了. 对于构造具有优秀品质的非协调等参元模型来说,这是一个值得进一步研究的问题. 不难想象,只考虑自然坐标下位移函数的完备性,即使可以获得较好的位移计算结果,但通过直角坐标下的微分关系去求应变和应力,则不能得到我们所期待的比位移低一阶(平面问题)的完备的应力场.

为获得直角坐标下具有完备性(如线性完备)的应力场,直接采用直角坐标来构造单元位移场是一种很自然的想法. 但在方法的实施上却存在很多困难.

以简单的四边形平面四结点单元(不含结点旋转自由度)为例,我们就不可能构造出一种对于歪斜单元也具有协调性的位移场. 在这种情况下得到的将是以直角坐标表示的非协调位移场. 由于无法使用直角坐标分离出单元非协调位移部分,因而为使单元通过分片检验而对单元进行改造时将会遇到极大困难.

在本文的研究中,保留了单元位移场采用自然坐标来描述的方法(因而可以十分方便地构造出基本的单元协调位移场),另一方面,我们强调单元总位移在直角坐标下具有完备性. 文中以四边形平面四结点单元为例,分别建立了含有不同数量内部参数的三种非协调单元模型. 数值实验结果表明,新单元具有良好的品质,特别是应力计算结果可以得到明显改善.

## 2 总位移在直角坐标下二次完备的单元位移场

四边形平面四结点单元(图 1)的位移函数可表示为协调与非协调两部分之和

$$\underline{u} = \begin{Bmatrix} u \\ v \end{Bmatrix} = \underline{u}_c + \underline{u}_\lambda \quad (1)$$

其中双线性协调位移为

$$\underline{u}_c = \sum_{i=1}^4 \frac{1}{4} (1 + \xi_i \xi) (1 + \eta_i \eta) \begin{Bmatrix} u_i \\ v_i \end{Bmatrix} \quad (2)$$

或等价地表示为

$$u_c = c_1 + c_2 \xi + c_3 \eta + c_4 \xi \eta \quad (3a)$$

$$v_c = c_5 + c_6 \xi + c_7 \eta + c_8 \xi \eta \quad (3b)$$

非协调位移可表示成

$$\underline{u}_\lambda = \underline{N}_\lambda \underline{\lambda} \quad (4)$$

对图 1 四结点平面元,坐标的等参变换式为

$$x = a_1 + a_1 \xi + a_3 \eta + a_2 \xi \eta = a_1 + \bar{x} \quad (5a)$$

$$y = b_1 + b_1 \xi + b_3 \eta + b_2 \xi \eta = b_1 + \bar{y} \quad (5b)$$

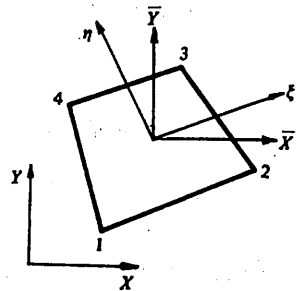


图 1 四结点平面单元

其中

$$\begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{Bmatrix} = \underset{\sim}{A} \underset{\sim}{X} \tag{6a}$$

$$[b_1 \ b_2 \ b_3 \ b_4]^T = \underset{\sim}{A} \underset{\sim}{Y} \tag{6b}$$

式中  $\underset{\sim}{X}, \underset{\sim}{Y}$  为总坐标下单元结点坐标值向量。

若设单元总位移场在直角坐标下二次完备, 即取

$$u = a_1 + a_3x + a_5y + a_7x^2 + a_9y^2 + a_{11}xy \tag{7a}$$

$$v = a_2 + a_4x + a_6y + a_8x^2 + a_{10}y^2 + a_{12}xy \tag{7b}$$

以(7a)式为例, 将变换式(5)代入并进行整理后得

$$\begin{aligned} u &= (\beta_1 + \beta_2\xi + \beta_3\eta + \beta_4\xi\eta) + \beta_5\xi^2 + \beta_6\eta^2 + \beta_7\xi^2\eta + \beta_8\xi\eta^2 + \beta_9\xi^2\eta^2 \\ &= u_1 + (\beta_5\xi^2 + \beta_6\eta^2) + \beta_7\xi^2\eta + \beta_8\xi\eta^2 + \beta_9\xi^2\eta^2 \end{aligned} \tag{8}$$

在上式中, 双线性部分已被改为协调位移  $u_1$  来表示。从(8)式立即可以看出, 总位移在自然坐标下二次完备的 Wilson 元位移函数在直角坐标下并不能完备到二次。为获得直角坐标下二次完备的总位移场, 在  $u$  中除了  $\xi^2, \eta^2$  这两项外还必须补充  $\xi^2\eta, \xi\eta^2$  和  $\xi^2\eta^2$  这三项, 即将非协调位移取为

$$\underset{\sim}{u}_\lambda = \begin{bmatrix} \xi^2 & 0 & \eta^2 & 0 & \xi^2\eta & 0 & \xi\eta^2 & 0 & \xi^2\eta^2 & 0 \\ 0 & \xi^2 & 0 & \eta^2 & 0 & \xi^2\eta & 0 & \xi\eta^2 & 0 & \xi^2\eta^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_{10} \end{Bmatrix} \tag{9}$$

### 3 分片检验条件及 $NQ_6$ 元

数值实验表明, 利用总位移在直角坐标下二次完备的非协调位移试解(9)所构造的内参型非协调元计算结果明显地优于 Wilson 的  $Q_6$  元。但和  $Q_6$  一样, 基于试解(9)的非协调元也不能通过分片检验, 所以还必须对(9)式试解加以改造, 使其满足收敛条件。

Irons 的常应力分片检验<sup>[3]</sup>可表示为

$$\sum_{\sigma_0} \oint_{\sigma_0} \underset{\sim}{\sigma}_0^T \underset{\sim}{n}^T \underset{\sim}{u}_\lambda ds = 0 \tag{10}$$

式中  $\underset{\sim}{\sigma}_0$  为单元常应力向量。在平面问题中

$$\underset{\sim}{n} = \begin{bmatrix} l & 0 & m \\ 0 & m & l \end{bmatrix}$$

$l, m$  为单元边界外法线的方向余弦。

条件(10)和单元剖分有关, 由此来确定  $u_\lambda$  甚感不便, 可改用更强的单片检验条件<sup>[4]</sup>

$$\oint_{\sigma_0} \underset{\sim}{\sigma}_0^T \underset{\sim}{n}^T \underset{\sim}{u}_\lambda ds = 0 \tag{11}$$

或

$$\oint_{\bar{\Sigma}} \bar{n}^T \bar{u}_i ds = 0 \quad (12)$$

直接使用(12)式会碰到两个问题:

- 1)  $\bar{u}_1 + \bar{u}_2$  的完备性可能遭到破坏,
- 2)  $\bar{u}_1$  与  $\bar{v}_1$  的对称性可能被破坏.

文[4,5]提出的生成非协调位移函数的虚参数法,有效地解决了上面两个问题,并且得到了 Wilson 元的修正单元  $NQ_6$  元.  $NQ_6$  元可以通过分片检验并保留了 Wilson 元精度高的特点. 本文根据虚参数法对(9)式进行修正,容易得到可通过分片检验的非协调位移模式

$$\bar{u} = \begin{bmatrix} \bar{N}_1 & 0 \\ \bar{N}_2 & 0 \\ 0 & \bar{N}_3 \end{bmatrix} \bar{\lambda} \quad (13)$$

其中

$$\bar{N}_i = \left[ \xi^2 - \frac{2}{3A}(B\xi - C\eta) \mid \eta^2 + \frac{2}{3A}(B\xi - C\eta) \mid \xi^2 \eta - \frac{1}{3}\eta \mid \xi \eta^2 - \frac{1}{3}\xi \mid \xi^2 \eta^2 \right] \quad (14)$$

式中

$$A = a_1 b_3 - a_3 b_1 > 0 \quad (4A \text{ 为单元面积}) \quad (15a)$$

$$B = a_1 b_2 - a_2 b_1 \quad (15b)$$

$$C = a_2 b_3 - a_3 b_2 \quad (15c)$$

注意到内部位移参数  $\bar{\lambda}$  与协调位移参数  $c_i$  ((3)式)的独立性,由简单的线性变换即可知(14)式中的  $\xi, \eta$  项不会破坏  $\bar{u}_i$  的常应变条件,同时也不会破坏总位移在直角坐标下的二次完备性. 根据(13)式中得到的非协调元每个位移分量含 9 个独立参数,文中称为  $NQ_9$  元.

#### 4 $NQ_7$ 元和 $NQ_8$ 元

$NQ_9$  元每个位移分量含五个内部参数,形成单刚时为凝聚这些参数所用机时相对增加. 采用下述方法,可在不破坏总位移在直角坐标下二次完备的前提下减少单元内部参数.

考察(7)式位移函数,由变换式(5)知双线性协调位移函数一般情况下可以且仅可以精确表示直角坐标下的线性函数,即(7)式前三项. 因而(7)式后三项一般情况下都将含有非协调成份. 将变换式(5)代入后三项得

$$x^2 = \xi, \eta \text{ 的双线性函数} + f_1 \quad (16a)$$

$$y^2 = \xi, \eta \text{ 的双线性函数} + f_2 \quad (16b)$$

$$xy = \xi, \eta \text{ 的双线性函数} + f_3 \quad (16c)$$

其中

$$f_1 = \bar{x}^2 - 2a_1 a_3 \xi \eta \quad (17a)$$

$$f_2 = \bar{y}^2 - 2b_1 b_3 \xi \eta \quad (17b)$$

$$f_3 = \bar{xy} - (a_1 b_3 + a_3 b_1) \xi \eta \quad (17c)$$

或用自然坐标表示成

$$f_1 = a_1^2 \xi^2 + a_3^2 \eta^2 + 2a_1 a_2 \xi^2 \eta + 2a_2 a_3 \xi \eta^2 + a_2^2 \xi^2 \eta^2 \quad (18a)$$

$$f_2 = b_1^2 \xi^2 + b_3^2 \eta^2 + 2b_1 b_2 \xi^2 \eta + 2b_2 b_3 \xi \eta^2 + b_2^2 \xi^2 \eta^2 \quad (18b)$$

$$f_3 = a_1 b_1 \xi^2 + a_3 b_3 \eta^2 + (a_1 b_2 + a_2 b_1) \xi^2 \eta + (a_3 b_2 + a_2 b_3) \xi \eta^2 + a_2 b_2 \xi^2 \eta^2 \quad (18c)$$

将(16)式代入(7a)式并将其中双线性部分与(7a)前三项合并,于是得到

$$\begin{aligned} u &= (\beta_1 + \beta_2 \xi + \beta_3 \eta + \beta_4 \xi \eta) + \alpha_7 f_1 + \alpha_9 f_2 + \alpha_{11} f_3 \\ &= u_7 + \alpha_7 f_1 + \alpha_9 f_2 + \alpha_{11} f_3 \end{aligned} \quad (19)$$

这样我们获得每个位移分量只含三个内部参数的非协调位移函数

$$\tilde{u} = \begin{bmatrix} f_1 & 0 & f_2 & 0 & f_3 & 0 \\ 0 & f_1 & 0 & f_2 & 0 & f_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_6 \end{Bmatrix} \quad (20)$$

运用虚参数法对上式进行修正,得到可以通过分片检验的单元非协调位移函数

$$\tilde{u} = \begin{bmatrix} f_1^* & 0 & f_2^* & 0 & f_3^* & 0 \\ 0 & f_1^* & 0 & f_2^* & 0 & f_3^* \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_6 \end{Bmatrix} \quad (21)$$

其中

$$f_1^* = f_1 - r_1(a_1 \xi + a_3 \eta) \quad (22a)$$

$$f_2^* = f_2 - r_2(b_1 \xi + b_3 \eta) \quad (22b)$$

$$f_3^* = f_3 - s_1 \xi - s_2 \eta \quad (22c)$$

式中

$$r_1 = \frac{2}{3A}(a_1 B + a_3 C), \quad r_2 = \frac{2}{3A}(b_1 B + b_3 C),$$

$$s_1 = \frac{1}{2}(a_1 r_2 + b_1 r_1), \quad s_2 = \frac{1}{2}(a_3 r_2 + b_3 r_1)$$

根据(21)式非协调位移函数构造的单元文中称为  $NQ_7$  元。

$NQ_7$  和  $NQ_9$  元的总位移在直角坐标下都具有二次完备性,  $NQ_7$  元由于内部自由度较少而显得更为优越。但在使用  $NQ_7$  元时,计算程序要针对下述情况稍作处理。

非协调位移对应的应变能为

$$U_\lambda = \frac{t}{2} \int_{\Omega} (\underline{D} \underline{u}_\lambda)^T \underline{C} (\underline{D} \underline{u}_\lambda) dA = \underline{\lambda}^T \underline{R} \underline{\lambda} \quad (23)$$

式中  $\underline{C}$  为弹性矩阵,  $\underline{D}$  为应变算子矩阵,  $t$  为单元厚度。

为凝聚参数  $\underline{\lambda}$ , 需要  $\underline{R}$  的逆阵。当单元有畸变时  $\underline{R}$  为  $6 \times 6$  可逆矩阵, 当单元为矩形时即当  $e = |a_2| + |a_3| + |b_1| + |b_2| = 0$  时, 由于  $f_3^* = 0$  而使  $\underline{R}$  的秩变为 4。此时为保证凝聚过程正常进行, 应在  $\underline{R}$  阵中划去与  $f_3^*$  对应的行和列, 然后按  $4 \times 4$  阶矩阵求逆。在程序实施时只要根据  $e$  值的大小增设一个判断语句即可保证  $\underline{R}$  在任意形状下可逆。显然, 对矩形单元删去  $\underline{R}$  中  $f_3^*$  对应的行和列并不破坏总位移在直角坐标下的二次完备性。

为保证  $\underline{R}$  阵在任意单元形状下可逆, 还可以采用下述方法来构造单元非协调位移场。设单元总位移在直角坐标下二次完备, 单元总位移场如(7)式所示。若对位移场施加平衡约束, 则由无体力时的平衡方程(平面应力)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{1+\mu}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} = 0 \quad (24a)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{1+\mu}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = 0 \quad (24b)$$

可消去参数  $a_{11}$  及  $a_{12}$

$$a_{11} = c_2 a_8 + c_1 a_{10}$$

$$a_{12} = c_1 a_7 + c_2 a_9$$

其中

$$c_1 = -\frac{4}{1+\mu}; \quad c_2 = -2\frac{1-\mu}{1+\mu}$$

对平面应变问题应将泊松比  $\mu$  换为  $\frac{\mu}{1-\mu}$ . 于是单元总位移可表示为

$$u = a_1 + a_3 x + a_5 y + a_7 x^2 + a_8 (c_2 xy) + a_9 y^2 + a_{10} (c_1 xy) \quad (25a)$$

$$v = a_2 + a_4 x + a_6 y + a_7 (c_1 xy) + a_8 x^2 + a_9 (c_2 xy) + a_{10} y^2 \quad (25b)$$

将坐标变换式(5)代入上式并将变换后的双线性项合并,则有

$$u = u_7 + a_7 f_1 + a_8 c_2 f_3 + a_9 f_2 + a_{10} c_1 f_3 \quad (26a)$$

$$v = v_7 + a_7 c_1 f_3 + a_8 f_1 + a_9 c_2 f_3 + a_{10} f_2 \quad (26b)$$

式中  $f_i (i=1, 2, 3)$  同(17)或(18)式. 由(26)式得到每个位移分量(平均)只含两个内部参数的非协调位移场

$$\tilde{u}_\lambda = \begin{bmatrix} f_1 & c_2 f_3 & f_2 & c_1 f_3 \\ -c_1 f_3 & f_1 & c_2 f_3 & f_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_4 \end{Bmatrix} \quad (27)$$

运用虚参数法对上式进行修正, 获得满足分片检验条件的非协调位移函数

$$\tilde{u}_\lambda = \begin{bmatrix} f_1^* & c_2 f_3^* & f_2^* & c_1 f_3^* \\ -c_1 f_3^* & f_1^* & c_2 f_3^* & f_2^* \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_4 \end{Bmatrix} \quad (28)$$

其中  $f_i^* (i=1, 2, 3)$  见(22)式. (28)是个  $u-v$  偶合型的非协调函数, 这是对位移试解引入平衡约束(24)的结果.

采用(28)式非协调位移函数的单元文中称为  $NQ_6^*$  元.  $NQ_6^*$  元和  $Q_6$  元含有同样多的单元内部参数, 且当单元为矩形时  $NQ_6^*$  元将蜕化为  $Q_6$  元(差一常数, 对应力、应变无贡献).

## 5 数值实验

以下各例中,  $Q_4$  为双线性协调元,  $Q_6$  为 Wilson 非协调元,  $NQ_6^*$  为文[5]中的非协调元. 对于本文建立的三种单元:  $NQ_6$ ,  $NQ_7$ ,  $NQ_6^*$ , 在生成单元刚阵时采用  $3 \times 3$  高斯积分, 其余单元均采用  $2 \times 2$  高斯积分.

例1. 图2为常应力受拉杆, 对任意的剖分格式本文三种单元均可得到位移和应力的精确解, 因而可通过分片检验, 而  $Q_6$  元则不能. 计算结果见表1.

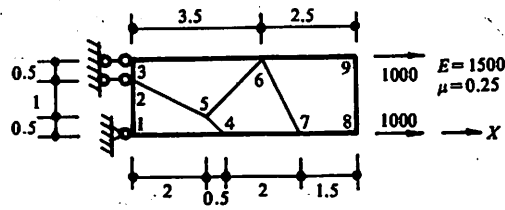


图 2 常应力受拉杆

表 1 计算结果

单元	$u_4$	$u_5$	$u_8$	$\sigma_{s4}$	$\sigma_{s5}$	$\sigma_{s8}$
$Q_4$	1.6667	1.3333	2.3333	1000	1000	1000
$Q_8$	1.6925	1.4762	2.6852	1873.6	632.8	521.5
$NQ_5$	1.6667	1.3333	2.3333	1000	1000	1000
$NQ_9$	1.6667	1.3333	2.3333	1000	1000	1000
$NQ_7$	1.6667	1.3333	2.3333	1000	1000	1000
$NQ_6$	1.6667	1.3333	2.3333	1000	1000	1000
精确解	1.6667	1.3333	2.3333	1000	1000	1000

例 2. 图 3 悬臂梁在两种荷载工况下的计算结果列于表 2. 其中 A、a 点分别为①单元上、下边中点. 可以看出, 本文三种单元都给了很好的应力结果.

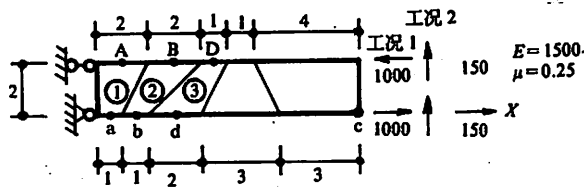


图 3 悬臂梁两种荷载工况

表 2 计算结果

单元	工况 1			工况 2		
	$V_c$	$\sigma_{sA}$	$\sigma_{sa}$	$V_c$	$\sigma_{sA}$	$\sigma_{sa}$
$Q_1$	45.65	-1761.7	2776.6	50.96	-2447.9	3949.9
$NQ_1$	96.06	-2439	4158	97.98	-3294	5696
		(-3014)	(3007)		(-4073)	(4137)
$NQ_2$	95.42	-2997.5	2951.5	97.28	-4032.5	4097.8
$NQ_3$	96.06	-3007.1	3023.2	97.98	-4034.6	4216.7
$NQ_4$	95.85	-3010.1	3019.5	97.84	-4050.3	4197.0
解析解	100	-3000	3000	102.6	-4050	4275

注: 括号内应力值为双线性外推结果.

例 3. 图 4 悬臂梁受分布剪力作用, 单元剖分同图 3. 计算结果列于表 3, 其中 A、B、D 和 a、b、d 分别为①、②、③单元的上、下边中点.

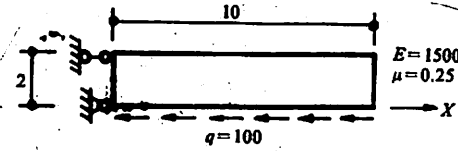


图 4 悬臂梁受分布剪力作用

表 3 计算结果

单元	$u_c$	$v_c$	$\sigma_{xA}$	$\sigma_{xB}$	$\sigma_{xB}$	$\sigma_{xB}$	$\sigma_{xB}$	$\sigma_{xB}$
Q <sub>4</sub>	-3.967	-16.28	370.7	-1805	272.3	-1158	236.2	-677.2
NQ <sub>6</sub>	-6.555	-33.03	618.7	-2449	531.1	-2260	1184	-1132
			(955)	(-1902)	(807.7)	(-1707)	(712)	(-1368)
NQ <sub>8</sub>	-6.552	-33.01	953.9	-1904	815.6	-1690	683.0	-1383.
NQ <sub>7</sub>	-6.554	-33.02	952.3	-1908	829.6	-1663	634.3	-1407
NQ <sub>6</sub>	-6.545	-32.98	953.3	-1906	820.4	-1684	672.3	-1390
解析解	-6.667	-33.17	900	-1900	700	-1700	550	-1400

注:括号内应力值为双线性外推结果.

例 4. 图 5 所示受内压圆环, 利用对称性取一条 4 个单元计算, 结果列于表 4. 其中 1~4 点分别为 1~4 单元的中点( $\xi=\eta=0$ ). 单元中点应力值为直接抽样值.

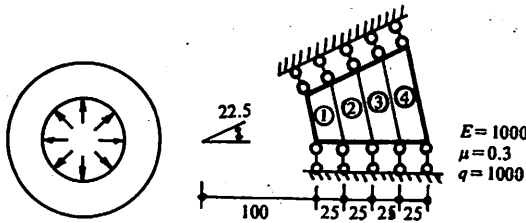


图 5 受内压圆环

表 4 计算结果

单元	$u_{rA}$	$u_{rB}$	$\sigma_{r1}$	$\sigma_{r2}$	$\sigma_{r3}$	$\sigma_{r4}$
Q <sub>4</sub>	19.23	12.98	-69.77	-35.77	-16.26	-4.04
NQ <sub>6</sub>	19.49	13.10	-67.65	-34.26	-15.14	-3.18
NQ <sub>8</sub>	19.49	13.10	-71.95	-37.02	-17.07	-4.61
NQ <sub>7</sub>	19.49	13.10	-71.23	-36.72	-16.94	-4.54
NQ <sub>6</sub>	19.49	13.10	-71.23	-36.72	-16.94	-4.54
解析解	19.67	13.33	-72.02	-37.19	-17.16	-4.59

## 6 结论

由以上算例看出, 对于含有内位移的非协调元只考虑自然坐标下位移函数的完备性虽然可以有效地改善位移计算精度, 但是所求得的应力精度以及单元内应力分布规律却并不理想. 本文利用直角坐标下位移函数的完备性所构造的单元不但可以获得良好的位移计算精度, 而



且不用外推处理即可以得到很好的应力计算精度和单元内合理的应力分布规律. 可见, 在非协调等参元研究中注意到总位移场在直角坐标下的完备性对于改善单元品质是有效的.

关于内参型非协调元数值稳定性问题, 文[10]提出了单元间的弱连接条件和  $u_x$  与  $u_y$  之间相互线性独立的要求. 显然可见, 本文建议的各种非协调元满足了这些条件和要求, 因而解的唯一存在性是有保证的. 顺便指出, 在许多情况下对  $NQ_6$ 、 $NQ_7$  和  $NQ_8$  也可以采用  $2 \times 2$  的低阶高斯积分. 但是必须注意单元零能模式出现的可能性, 如文[10]指出的那样. 有趣的是,  $NQ_7$  和  $NQ_8$  元采用  $2 \times 2$  或  $3 \times 3$  高斯积分得到的计算结果几乎一致.

### 参 考 文 献

- [1] Cook R D, Concepts and Applications of Finite Element Analysis, 2nd Ed. John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [2] Wilson E L, Taylor R L, Donerty W P and Ghabussi J, Incompatible displacement models, in Numerical Computer Methods in Structural Mechanics (Ed Fenves S J et al), Academic Press, New York, 43-45, 1973.
- [3] Taylor R L, Beresford P J, and Wilson E L, A non-conforming element for stress analysis, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 10(1976), 1211-1219.
- [4] Wu C C, Huang M G and Pian T H H, consistency condition and convergence criteria of incompatible elements, general formulation of incompatible functions and its application, *Computers & Structures*, 27(1987), 639-644.
- [5] Pian T H H and Wu C C, General formulation of incompatible shape function and an incompatible isoparametric element, in Proc. Invitational China-America Workshop on F. E. M., 159-165, Chengde China, June 2-6, 1986.
- [6] Wu C C and Bufler H, Multivariable finite elements; consistency and optimization, *SCIENCE IN CHINA (A)*, 34(1991), 284-299.
- [7] Wu C C and Cheung Y K, The patch test condition in curvilinear coordinate system—formulation and application, *SCIENCE IN CHINA (A)*, No. 7, 1992(in press).
- [8] Jiao Z P, Wu C C and Pian T H H, Geometrically nonlinear analysis of Mindlin plate using the incompatible bending elements with internal shear strain, *Appl. Meth. Meth.*, (in press).
- [9] Strang G and Fix G J, An Analysis of the Finite Element Method, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1973.
- [10] Wu C C and Cheung Y K, Numerical stability and constitution analysis of  $\lambda$ -type incompatible elements, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 31 (1991), 1669—1682.

## A Study on the Completeness of Displacement Trial Function of Incompatible Elements with Internal Parameters

Jiao Zhaoping

*(Hefei University of Technology)*

Wu Changchun      Huang Maoguang

*(University of Science and Technology of China)*

### Abstract

It is proposed in the paper that the completeness of displacement functions in physical coordinates deserves consideration in the development of the incompatible finite elements with internal parameters. In this way, three 2D isoparametric incompatible elements with quadratic completeness in Cartesian coordinates have been constructed. They show better stress solutions than those of incompatible ones with the completeness in natural coordinates.

**Key words:** incompatible element, Cartesian coordinates, completeness of trial function

# 实二次函数域的一个结果

邢朝平

(数学系)

摘 要

基于 Pell 方程的一个解,我们得到了一个元素是实二次函数域基本单位的充分条件,并给出这个结果在实二次函数域类数 1 问题中的应用.

关键词: Pell 方程,基本单位,类数

中图法分类号: O156.2

AMS Subject Classification(1991): 11R58

MacRae<sup>[1]</sup>完全确定了理想类数为 1 的全部虚二次函数域. 然而,实二次函数域类数 1 问题仍然没有解决,困难主要是由于实二次函数域的理想类数与其基本单位密切相关.

本文通过 Pell 方程的解确定一个二次函数域的一类基本单位,并在类数 1 问题中得到应用.

设  $F_q$  是  $q$  个元素的有限域,  $q$  是奇数. 设  $k = F_q(t)$  是理函数域, 令  $D(t)$  是  $F_q[t]$  中首 1 偶次的无平方因子多项式,  $K = k(\sqrt{D})$ . 本文中, 我们总假设  $\deg D(t) \geq 4$ .

若  $A_0 + B_0 \sqrt{D}$  是  $K = k(\sqrt{D})$  的基本单位, 则  $A_0^2 - B_0^2 D = g$ , 其中  $g$  是循环群  $F_q^*$  的生成元, 故必有  $A_0^2$  的首项系数  $\text{sgn}(A_0^2)$  等于  $B_0^2$  的首项系数  $\text{sgn}(B_0^2)$ , 即  $\text{sgn}(A_0) = \pm \text{sgn}(B_0)$ . 又由于  $A_0 + B_0 \sqrt{D}$  是  $K$  的基本单位, 故  $A_0 - B_0 \sqrt{D}$  也是  $K$  的基本单位, 因而  $K$  中一定有基本单位  $A_0 + B_0 \sqrt{D}$  使  $\text{sgn}(A_0) = \text{sgn}(B_0) = 1, A_0, B_0 \in F_q[t]$ .

引理 1 设  $A, B \in F_q[t]$  且  $(A, B)$  是 Pell 方程

$$X^2 - Y^2 D = g \tag{1}$$

的解, 则下列三条等价

(i)  $\deg A - 2\deg B > 1$

(ii)  $\deg A < 1 + \deg D$

(iii)  $2\deg B < 2 + \deg D$

证明 由于  $A^2 - B^2D = g$ , 故  $2\deg A = 2\deg B + \deg D$ . 由此方程立得引理中三条等价.

引理 2 设  $A, B$  是  $F_r[t]$  中两个首 1 多项式, 且  $(A, B)$  是 Pell 方程  $X^2 - Y^2d = g$  的解, 令

$$A_n + B_n \sqrt{D} = (A + B \sqrt{D})^{2n+1} \quad n = 1, 2, \dots$$

则序列  $\{\deg A_n\}$  及  $\{\deg B_n\}$  都是严格递增的.

证明 由于  $A^2 - B^2D = g$ , 故  $\deg A = \frac{1}{2}\deg D + \deg B \geq \frac{1}{2}\deg D \geq 2$ . 又

$$\begin{aligned} (A + B \sqrt{D})^{2n+1} &= \left( A^{2n+1} + \binom{2n+1}{2} A^{2n-1} B^2 D + \dots + \binom{2n+1}{2n} A B^{2n} D^n \right) \\ &+ \left( \binom{2n+1}{1} A^{2n} B + \binom{2n+1}{3} A^{2n-2} B^3 D + \dots + \binom{2n+1}{2n+1} B^{2n+1} D^n \right) \sqrt{D} \end{aligned}$$

由于  $\deg A = \frac{1}{2}\deg D + \deg B$ , 故

$$\deg A^{2n+1} = \deg(A^{2n-1} B^2 D) = \dots = \deg(AB^{2n} D^n)$$

且

$$\deg(A^{2n} B) = \deg(A^{2n-2} B^3 D) = \dots = \deg(B^{2n+1} D^n)$$

又由于

$$\begin{aligned} &\left( 1 + \binom{2n+1}{2} + \dots + \binom{2n+1}{2n} \right) \\ &= \binom{2n+1}{1} + \binom{2n+1}{3} + \dots + \binom{2n+1}{2n+1} = 2^{2n} \end{aligned}$$

而且  $g$  是奇数, 故 2 不是  $F_r$  中零元素.

从而

$$\deg A_n = \deg(A^{2n+1}) = \deg(A^{2n-1}) + 2\deg A = \deg A_{n-1} + 2\deg A$$

$$\geq 4 + \deg A_{n-2} > \deg A_{n-1}$$

$$\deg B_n = \deg(A^{2n} B) = \deg(A^{2n-2} B) + 2\deg A \geq \deg B_{n-1} + 4$$

引理 3 设  $A_0, B_0$  是  $F_r[t]$  中两个首 1 多项式, 且  $\varepsilon_0 = A_0 + B_0 \sqrt{D}$  是  $K = k(\sqrt{D})$  的基本单位, 如果令  $A_1 + B_1 \sqrt{D} = (A_0 + B_0 \sqrt{D})^3$ , 则

$$\deg A_1 > 1 + \deg D, \quad \deg B_1 > 2 + \deg D$$

证明  $A_1 + B_1 \sqrt{D} = (A_0 + B_0 \sqrt{D})^3 = (A_0^3 + 3A_0 B_0^2 D) + (B_0^3 D + 3A_0^2 B_0) \sqrt{D}$ .

由于  $\deg A_0^3 = \deg(A_0 B_0^2 D)$ , 并且  $1 + 3 = 4$  不是  $F_r$  中零元素, 故  $\deg A_1 = 3\deg A_0 \geq \frac{3}{2}\deg D$

$$= \deg D + \frac{1}{2} \cdot \deg D > 2 + \deg D.$$

同理,  $\deg B_1^2 = 2\deg(B_0^3 D) \geq 2\deg D \geq \deg D + 4$ .

定理 设  $A_0, B_0$  是  $F_r[t]$  中两个首 1 多项式, 且  $(A_0, B_0)$  是 Pell 方程  $X^2 - Y^2D = g$  的解, 如果  $A_0, B_0$  满足下列三条之一

(i)  $\deg A - 2\deg B > 1$

(ii)  $\deg A < 1 + \deg D$

(iii)  $2\deg B < 2 + \deg D$

则  $\varepsilon_0 = A_0 + B_0 \sqrt{D}$  就是  $K = k \sqrt{D}$  的基本单位.

证明 若  $\varepsilon_0$  不是  $K$  的基本单位, 设  $\varepsilon_D = A_D + B_D \sqrt{D}$  是  $K$  的基本单位. 且  $A_D, B_D$  的首项系数为 1, 则存在  $m \in \mathbb{N}$  使  $\varepsilon_D = \varepsilon_D^{2m+1} = (A_D + B_D \sqrt{D})^{2m+1}$ .

$$\text{令 } A_m + B_m \sqrt{D} = (A_D + B_D \sqrt{D})^{2m+1}$$

则  $A_0 = A_m, B_0 = B_m$ , 由引理 2 知,

$$\deg A_D < \deg A_1 \leq \deg A_m = \deg A_0$$

$$\deg B_D < \deg B_1 \leq \deg B_m = \deg B_0$$

又由引理 3,  $\deg A_1 > 1 + \deg D, \deg B_1 > 2 + \deg D$ , 与定理的假设矛盾.

推论 设  $A, B$  是  $F_0[l]$  中两个首 1 多项式, 且是 Pell 方程  $X^2 - Y^2 D = g$  的解, 如果  $(A, B)$  满足引理 1 中的三条之一, 则当  $\deg(D) \geq 12$  时,  $K$  的理想类数大于 1.

证明 令  $\varepsilon = A + B \sqrt{D}$ , 则由定理知道  $\varepsilon$  是  $K$  的基本单位. 因而  $\text{ord}_\infty(\varepsilon) = \deg A = \frac{1}{2} \deg D + \deg B < 1 + \deg D$ , 即  $\text{ord}_\infty(\varepsilon) \leq \deg D$ .

设  $h_1$  表示  $K$  的除子类数,  $h$  表示  $K$  的理想类数, 则有  $h_1 = \text{ord}_\infty(\varepsilon) \cdot h$ . 因而

$$h \geq h_1 / \deg D$$

由函数域的 zeta 函数知: 一定有  $2g = \deg D - 2$  个复数  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{2g}$ , 使  $|\omega_i| = \sqrt{q}$  且

$$h_1 = (1 - \omega_1) \cdots (1 - \omega_{2g}) \doteq |1 - \omega_1| \cdots |1 - \omega_{2g}| \geq (\sqrt{q} - 1)^{2g} = (\sqrt{q} - 1)^{\deg D - 2} \quad (2)$$

又由 [1] 知

$$h_1 \geq \frac{(q-1)(q^{\deg D - 3} + 1 - (2\deg D - 2) \cdot q^{(\deg D - 3)/2})}{(q^{(\deg D)/2} - 1)(\deg D - 3)} \quad (3)$$

当  $q \geq 5$  时, 用公式 (2) 可验证在  $\deg D \geq 12$  时,  $h_1 / \deg D > 1$ ; 当  $q = 3$  时, 用公式 (3) 可验证在  $\deg D \geq 12$  时,  $h_1 / \deg D > 1$ ; 故当  $\deg D \geq 12$  时,  $h \geq h_1 / \deg D > 1$ .

### 参 考 文 献

- [1] MacRae R E, *J. of Algebra*, 17(1971), 243-261.

## A Result of Real Quadratic Function Fields

Xing Chaoping

(Department of Mathematics)

### Abstract

In the present paper, the solutions of Pell equation are used to determine the fundamental unit of real quadratic function fields. The result is applied to the problem of ideal class number one of real quadratic function fields.

Key words: Pell equations, fundamental units, class number

# 聚乙二醇增强 Rh-6G 水溶液 发光能力的机制研究

李银妹 邓杰

(物理系)

摘 要

从添加聚乙二醇后的 Rh-6G 激光染料溶液的宏观性质及聚乙二醇与 Rh-6G 分子的相互作用的微观结构两个方面,探讨聚乙二醇增强 Rh-6G 荧光发射的机制。

关键词: 添加物,络合物,Rh-6G 染料

中图法分类号: O432.1

## 1 引言

近年的研究工作表明,将聚乙二醇添加到激光染料水溶液中,能够增强染料的荧光强度和激光输出,这可能是由于聚乙二醇抑制了染料在水溶液中形成二聚物所致<sup>[1,2]</sup>。本文从添加聚乙二醇后的 Rh-6G 激光染料溶液的吸收光谱、荧光光谱及其粘滞性等宏观性质,以及聚乙二醇与 Rh-6G 分子的相互作用的微观结构两个方面,进一步探讨聚乙二醇对该物质发射荧光的增强机制。

## 2 聚乙二醇的吸收光谱特性

聚乙二醇自身是无色透明体,它的水溶液在可见光谱区(450nm—600nm)基本上不存在吸收谱,在该谱区聚乙二醇是无荧光物质。图1是采用日本 UV-365 型分光光度计测得的聚乙二醇水溶液吸收光谱。因 Rh-6G 染料的吸收光谱波段为 460nm—580nm,荧光发射波段为 540nm—660nm,故而聚乙二醇添加到染料溶液中不吸收染料分子发射的荧光。本实验中所用

的激发光源为 530nm 脉冲激光, 聚乙二醇不可能吸收激发光能量. 分析它们的吸收光谱、激发光谱及荧光光谱<sup>[2]</sup>, 我们认为, 添加的聚乙二醇与 Rh-6G 形成络合物抑制了 Rh-6G 二聚物的形成, 即抑制了 Rh-6G 水溶液的无辐射跃迁, 增加了辐射跃迁几率, 使荧光得以增强.

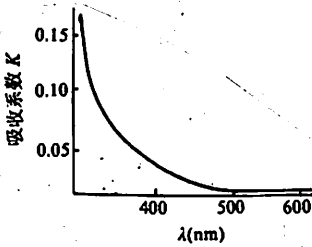


图 1 聚乙二醇水溶液吸收光谱

### 3 染料溶液的发光机制

Rh-6G 染料分子和聚乙二醇的高分子结构如图 2 所示. 对于 Rh-6G 这样氨基团未充分烷基化的物质, 其吸收极大值依赖于溶剂, 聚乙二醇的加入不易取代 Rh-6G 分子的某些基团, 通常在 Rh-6G 分子中的甲基取代基对吸收或是荧光都没有影响<sup>[3]</sup>. Rh-6G 分子在溶液中与聚乙二醇生成施主-受主电荷转移络合物, 这个过程既发生在基态, 也发生在激发态, 络合物只在激发态是稳定的, 不能由吸收光谱检验出来. 如果激发络合物是荧光的, 则必然出现一个新的荧光带, 原来的荧光带将随添加物的浓度的增加而消失<sup>[3]</sup>. 实验中, 我们测到 Rh-6G 水溶液的荧光光谱随着聚乙二醇添加剂量的增大产生红移<sup>[2]</sup>, 表明了聚乙二醇与 Rh-6G 分子的激发络合物具有荧光性.

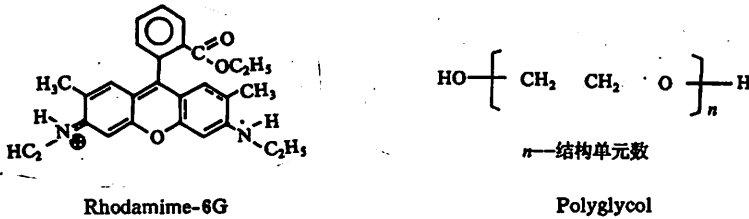


图 2 Rh-6G 分子与聚乙二醇分子结构

Rh-6G 染料分子与聚乙二醇高分子之间存在一个最佳络合条件. 当聚乙二醇添加剂量较少时, 在溶液中只有部分染料分子吸附在聚乙二醇分子上形成络合物. 剩余部分的 Rh-6G 染料分子在极性溶剂水的影响下形成二聚物; 当聚乙二醇的剂量逐渐增大时, 所生成的络合物的浓度也越来越大, 二聚物的浓度相对减小, 单体吸收强度逐渐上升. 由 Rh-6G 的吸收光谱(含二聚物吸收光谱)随聚乙二醇添加剂量的变化曲线<sup>[2]</sup>完全证实了这一点; 当聚乙二醇添加剂量足够大时(500mg/ml), Rh-6G 染料分子与聚乙二醇高分子完全络合, 这时溶液的性质恰好使 Rh-6G 染料分子之间的相互作用力近似为零, Rh-6G 染料具有最大的发光产额.

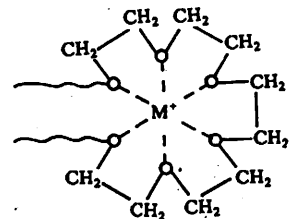


图 3 Rh-6G 与聚乙二醇生成施主-受主电荷转移络合物

在实验中还发现, 添加了聚乙二醇的 Rh-6G 水溶液放置一段时间后, 溶液中有沉淀析出, 沉淀物为红色粉末. 可以断定该沉淀物是 Rh-6G 染料粉末. 观察所配溶液, 聚乙二醇添加量少时, 沉淀现象明显, 添加量越大, 即溶液越粘滞, 越不易沉淀. 我们认为, 少量的聚乙二醇加

入到 Rh-6G 水溶液中时,由于聚乙二醇的溶剂化作用,使部分水附聚乙二醇上,作为聚乙二醇的一部分一起流动,未与聚乙二醇络合的 Rh-6G 染料分子在水溶液中处于过饱和状态,经过一段时间便呈红色粉末沉淀出来. 只有当聚乙二醇添加量足以与 Rh-6G 染料分子完全络合时,溶液是以络合物的形式溶于溶剂中,溶液中才不会生成沉淀物. 由此可见,不同分子量的聚乙二醇与 Rh-6G 染料分子存在一个最佳络合配比. 表 1 列出了 Rh-6G 水溶液放置半年后的观察结果.

表 1 不同分子量聚乙二醇不易沉淀的最低添加量

分子量	400	1000	10 <sup>4</sup>	2×10 <sup>4</sup>
最低添加剂量(mg/ml)	500	400	300	200

为了考察不同分子量聚乙二醇对 Rh-6G 染料吸收和荧光发射强度的影响,我们研究了, Rh-6G 单体吸收和荧光强度随着添加物的不同剂量的变化规律. 大量的实验结果表明,不同分子量的聚乙二醇对 Rh-6G 染料的吸收和荧光增强效果略有不同,但随着添加物的剂量的变化规律相似. 图 4 中 Rh-6G 染料的荧光强度随着聚乙二醇的添加剂量增加,荧光峰值强度迅速上升,在一定添加剂量时荧光强度达到饱和. 添加剂继续增加时,荧光强度基本保持不变,然后随着添加剂继续增加,荧光强度缓慢下降. 荧光峰值强度  $I_M$  与未加聚乙二醇时的强度  $I_0$  之比,  $I_M$  是  $I_0$  的 4 至 5 倍. 可见添加物对染料荧光的增强效果是相当可观的.

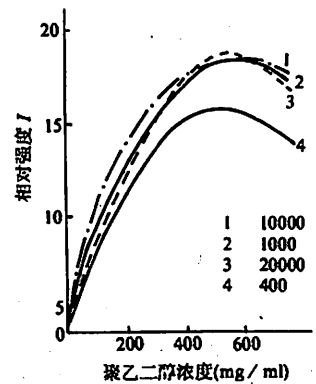


图 4 Rh-6G 荧光峰值强度与聚乙二醇分子量的关系

#### 4 溶液的宏观粘滞特性和微观结构

聚乙二醇溶液属热力学稳定均相体系,能自动溶解在溶剂中. 由于粒子较大(1nm—1 $\mu$ m)占有一定空间及扩散速度缓慢,阻碍了介质的自由运动. 如将它添加到 Rh-6G 水溶液中将束缚大量的自由染料分子,达到阻碍二个染料分子聚集的效果.

高分子溶液具有一定的粘滞性, Rh-6G—水—聚乙二醇溶液的粘滞性随着聚乙二醇添加剂量和分子量的不同而异. 同一种分子量时,添加剂量越大,具液体的粘滞性越大. 在相同的添加剂量情况下,添加物的分子量越大液体的粘滞性也越大. 具有适当粘滞性的溶液较非粘性(如纯水)和强粘性溶剂(如胶体),其荧光寿命长,有利于物质发光<sup>[3,4]</sup>. 在这里所表现的宏观粘滞性实际上是溶剂微观粘滞性的总体平均效果. 其实质上是染料分子  $M^+$  与溶剂分子之间形成氢键的扭力所致<sup>[5]</sup>. 我们认为染料分子中可发射荧光的电子激发态可通过一种分子的内旋转运动弛豫到另外一个构型,再由此态很快地无辐射跃迁返回到基态. 这种内部扭转运动在溶剂中因受到粘滞性的阻碍,使荧光增强. 实验中发现,随着聚乙二醇的添加剂量的增加, Rh-6G 染料发射的荧光增强,溶液的粘滞系数也增大. 这些结果证实了上述分析的结论.



## 5 结束语

聚乙二醇添加到 Rh-6G 水溶液中能够有效地增强 Rh-6G 的吸收和荧光发射强度<sup>[4]</sup>。从聚乙二醇高分子与 Rh-6G 染料分子在溶液中相互作用的微观结构分析,这种增强的机制在于添加适当剂量的聚乙二醇能有效地抑制染料分子的无辐射跃迁过程。Rh-6G 染料分子在溶液中与聚乙二醇分子形成稳定的激发络合物,这种络合物是荧光性的。适量的添加剂能使 Rh-6G 染料分子完全络合化。溶液的性质恰好使 Rh-6G 染料分子之间的相互作用力近似为零,从而具有最大的发光产额。从溶液的宏观表现性质分析,适量的添加剂增大了溶液的粘滞性<sup>[4]</sup>,使染料分子具有较长的荧光寿命,从而增大了发光产额。

Rh-6G—水—聚乙二醇溶液特性的深入研究有助于从机制上搞清发光增强的机制,为寻求更有效的荧光增强剂提供实验和理论依据。同时,也有助于更有效地提高这种溶液作为染料激光介质的性能。因此无论从理论上还是实用性上这项研究工作都具有一定价值。

## 参 考 文 献

- [1] 楼立人等,中国激光,16(1989),No. 4,254.
- [2] 李银妹等,发光学报,11(1990),No. 3,199-204.
- [3] F. P. 舍费尔著[联邦德国],陈昌明等译,染料激光器,科学出版社,1987,149-156.
- [4] 李银妹,激光技术,15(1991),No. 6,349-353.

# Investigation on the Mechanism of Increasing Luminescent Yield of the Rh-6G Aqueous Solution by the Polyglycol Additives

Li Yinmei     Deng Jie

(Department of Physics)

## Abstract

Presented in this paper is a study on the mechanism of increasing luminescent yield of the Rh-6G solution by the polyglycol additives from both macroscopic properties of the dye solution added by polyglycols and the microstructure of the interaction between polyglycols and Rh-6G molecules.

**Key words:** additives, complex. Rh-6G dye

# 植物叶绿体色素的纸色谱分离

赵贵文 崔 华 罗思泉 尹香莲

(应用化学系)

## 摘 要

报道了一种新的以石油醚—氯仿—异丙醇(79:20:1)三元体系为展开剂,分离叶绿体色素的单向纸色谱法,能够完全分离高等植物中常见的六种叶绿体色素,叶绿素 $a$ 、叶绿素 $b$ 、 $\beta$ -胡萝卜素、叶黄素、紫黄质、新黄质和一种叶绿素 $a$ 的衍生物脱植基叶绿素 $a$ 。

关键词: 叶绿体色素,植物色素,纸色谱

中图法分类号: O657.7

## 1 前言

纸色谱是分离植物叶绿体色素的方法之一,文献已有一些报道[1-6]。但对于高等植物中主要的六种叶绿体色素,叶绿素 $a$ 、叶绿素 $b$ 、 $\beta$ -胡萝卜素、叶黄素、紫黄质、新黄质的分离,文献[1,2,4,6]报道的单向纸色谱法不太理想,对其中的某些色素只能部分分离或不能分离,虽然S. W. Jefferey[3]报道的双向纸色谱法能够完全分离上述六种色素,但双向纸色谱法需要较多的时间和溶剂,而且难以进行色素的制备。本文提出了以一种新的溶剂体系为展开剂,在此基础上建立了一种新的分离叶绿体色素的单向纸色谱法,对上述六种叶绿体色素和一种叶绿素 $a$ 的衍生物脱植基叶绿素 $a$ 能够完全分离。

## 2 实验

### 2.1 植物叶片

菠菜直接从市场购买,月季花和君子兰叶片均从本校花房中采集。

## 2.2 色素的提取

称取 1g 叶子样品,加 0.05gCaCO<sub>3</sub>,2g 无水 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>,5ml 预冷至 4℃的丙酮于瓷研钵内,研磨成匀浆,过滤,残渣用少量丙酮洗至无色,丙酮滤液放在通风橱中减压蒸发掉一部分溶剂,得丙酮提取液 4ml.

选用中国新华造纸厂生产的大张普通定性滤纸作为载体,使用前将滤纸裁成 22×20cm 的长条,按文献[2]方法进行处理.

## 2.3 展层

实验所用色谱缸为圆筒形,内径 9.5cm,高 28cm,在色谱缸内倒入 50ml 展开剂,把点好样的色谱纸放入其中,密闭,晕上黑布,在室温下展层,当溶剂前沿达到 18cm 时,展开时间约 80 分钟,取出晾干.

## 2.4 色素的鉴定

将色谱图上各斑点剪下,用不同的有机溶剂萃取,萃取液直接用岛津公司生产的 UV-240 型紫外可见分光光度计测定吸收光谱,所得的各色素的吸收光谱与文献值对照,从而鉴定各色素.

实验中所用试剂均为分析纯或优级纯.石油醚的沸程为 60~90℃.

## 3 结果和讨论

### 3.1 叶绿体色素的分离和鉴定

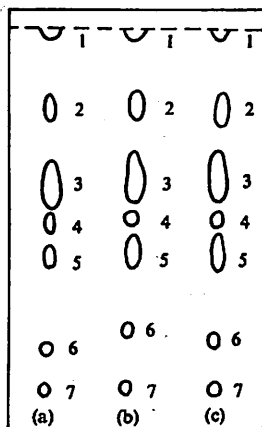


图 1 叶绿体色素分离的纸色谱图

点样量:5 $\mu$ l 温度:15℃

(a) 菠菜 (b) 月季花 (c) 君子兰

图 1 显示了从菠菜、月季花、君子兰叶片分离的色素的色谱图,表 1 给出了对应各色素的  $R_f$  值.良好的分离效果是展开剂组成为石油醚:氯仿:异丙醇=79:20:1 的条件下实现的,分离得到 7 个色谱斑.表 2 列出了各色素的吸收光谱鉴定数据.图 1 中 1 至 6 号(从上至下)色谱斑分别为  $\beta$ -胡萝卜素、叶黄素、叶绿素、紫黄质、叶绿素  $b$  和新黄质,留在原点位置的 7 号斑为黄色,用甲醇萃取后测定吸收光谱,在可见光区域没有吸收,在紫外区域则有吸收,且三种植物叶片所得 7 号斑的最大吸收完全不同,初步推测可能是黄酮类化合物,未进行进一步的鉴定.此外,当叶片提取液中存在叶绿素  $a$  的衍生物脱植基叶绿素  $a$  时,本文提出的方法也能将其与上述六种色素完全分离,其色谱斑位于图 1 中的 6 号与 7 号斑之间.

表1 色素的  $R_f$  值

NO.	色素	$R_f$	$R_f$	$R_f$
1	$\beta$ -胡萝卜素	0.99	0.99	0.99
2	叶黄素	0.78	0.78	0.78
3	叶绿素 a	0.58	0.59	0.59
4	紫黄质	0.46	0.48	0.48
5	叶绿素 b	0.37	0.38	0.38
6	新黄质	0.11	0.16	0.13

表2 在菠菜、月季花、君子兰叶片中所分离的色素的吸收光谱最大值

NO.	色素	颜色	溶剂	吸收光谱最大值(nm)		参考文献
				观测值	文献值	
1	$\beta$ -胡萝卜素	橙黄	石油醚	427,449,475	425,449,476	1
2	叶黄素	黄	乙醇	422,444,475	422,445,4761	1
3	叶绿素 a	蓝绿	乙醚	428,660	428,660	1
4	紫黄质	黄	乙醇	416,436,469	417,440,469	7
5	叶绿素 b	黄绿	丙酮	455,597,644	455,598,645	1
6	新黄质	黄	乙醇	412,436,468	414,436,466	1
7	原点	浅黄	—	—	—	—

### 3.2 展开剂组成对分离的影响

本文研究了以异丙醇—氯仿—石油醚三元体系为展开剂,其组成对分离的影响.表3列出了展开剂组成,图2显示了以菠菜叶片提取液为样品在不同的展开剂组成时的色谱图.当展开剂中不含氯仿时,即异丙醇:氯仿:石油醚=1:0:99,分离效果最差,只有 $\beta$ -胡萝卜素完全分离;当展开剂中不含异丙醇时,即异丙醇:氯仿:石油醚=0:30:70,叶绿素a与叶绿素b部分分离,叶绿素b与新黄质不能分离;当保持展开剂中异丙醇的含量为1%,将氯仿的含量从10%增加到20%,即石油醚的含量从89%减少到79%,主要的六种叶绿体色素都能完全分离,但当氯仿的含量超过20%时,紫黄质与叶绿素a重叠.由此可见,当展开剂组成一定范围内时,对六种色素都能完全分离,展开剂组成范围宽是本法的主要优点之一.

从图2还可以看出,色素的  $R_f$  值与展开剂组成密切相关.随着展开剂中氯仿含量的增加石油醚含量的下降,除 $\beta$ -胡萝卜素外,各个色

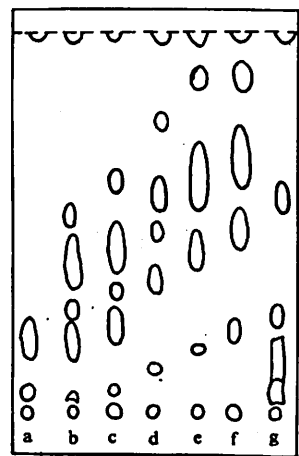


图2 展开剂组成对分离的影响  
点样量:5 $\mu$ l 温度:15 $^{\circ}$ C

素的  $R_f$  值增大. 一般认为纸色谱法是以滤纸中的水作为固定相, 样品的分离是由于在水和有机溶剂中的反复分配完成的,  $R_f$  值与分配系数  $K$  的关系如下:

$$R_f = \frac{1}{1 + \alpha K}, \quad K = \frac{C_w}{C_L}$$

式中  $C_w$  为样品在水中的浓度,  $C_L$  为样品在有机溶剂中的浓度,  $\alpha$  是由滤纸性质确定的一个常数. 类胡萝卜素的结构表明, 除  $\beta$ -胡萝卜素外的其它类胡萝卜素均含有一个以上的羟基和环氧基, 而叶绿素的结构中也含有一些极性基团, 因此当氯仿的含量增加, 溶剂的极性增强, 这些类胡萝卜素和叶绿素在有机溶剂中的溶解能力增大,  $K$  值变小, 故  $R_f$  值增加. 由于  $\beta$ -胡萝卜素不含羟基和其它极性基团, 故其  $R_f$  值几乎保持不变. 当固定展开剂的组成时, 可得出如下结论: 类胡萝卜素的  $R_f$  值随  $\beta$ -胡萝卜素、叶黄素、紫黄质、新黄质结构中羟基和环氧基的数目增加而减小.

表3 展开剂的组(体积比)

NO.	异丙醇:氯仿:石油醚	NO.	异丙醇:氯仿:石油醚
a	1:0:99	e	1:25:74
b	1:10:89	f	1:30:69
c	1:15:84	g	0:30:70
d	1:20:79		

### 2.3 点样量对分离的影响

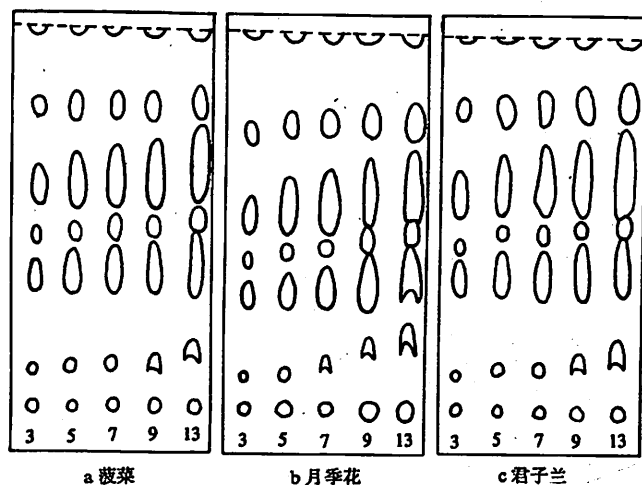


图3 点样量对分离的影响

不同的点样量对色谱斑的形状和分离效果均有影响, 如图3所示. 当点样量较少时(3~9 $\mu$ l), 所形成的色谱斑比较规整, 且彼此完全分离; 当点样量较多时( $\geq 13\mu$ l), 出现拖尾, 形成双尾的色谱斑, 色谱斑之间出现交叉, 分离效果变差, 尤其是紫黄质与叶绿素  $a$ 、 $b$  之间的分离变得困难. 与文献[4]的方法比较, 本文报道的纸色谱法具有较大的点样量. 这是本法的第二个

### 优点.

由图 3 可见,当菠菜的点样量达到  $9\mu\text{l}$ 、月季花的点样量达到  $7\mu\text{l}$ 、君子兰的点样量达到  $9\mu\text{l}$  时,出现双尾的色谱斑,特别是对移动速度较慢的组分影响较严重,移动速度最慢的新黄质首先出现双尾,随着点样量的增加,移动速度仅次于新黄质的叶绿素 *b* 也出现双尾. 色谱斑出现双尾的原因. H. H. Strain<sup>[4]</sup>曾经进行过研究,认为是由于叶片萃取液中所含的比色素吸附能力强得多的无色物质所致. 本文提出的体系在较大的点样量下才出现双尾现象,这是由于本文提出的溶剂体系极性较高,对无色的极性物质的溶解能力较强,使双尾现象减小.

### 3 结论

本文提出了一种新的以石油醚—氯仿—异丙醇(79:20:1)三元体系为展开剂,分离叶绿体色素的单向纸色谱法,能够完全分离高等植物中常见的六种叶绿体色素叶绿素 *a*、叶绿素 *b*、 $\beta$ -胡萝卜素、叶黄素、紫黄质和新黄质及一种叶绿素 *a* 的衍生物脱植基叶绿素 *a*. 该法具有展开剂组成范围宽和容纳的点样量大的优点,已用于花卉月季花和君子兰叶片中各种色素的分离,鉴定和制备.

### 参 考 文 献

- [1] Eskins K., Scholfield C R and Duten H J, *J. Chromatoge.*, 135 (1977), 217.
- [2] X. H. 波铄诺克著,荆家海,丁钟荣译,植物生物化学分析方法,科学出版社,1981年.
- [3] Jefferey s W, *Biochem. J.* 80(1961), 336.
- [4] Strain H H, Sherma U, Benten E L and Katz J J, *Biochem. Biophys. Acta*, 109 (1965), 1.
- [5] Strain H H, Sherma U, Benten E L and Katz J J, *Biochem. Biophys. Acta*, 109 (1965), 16.
- [6] Karitsa A A, *CHem Abstr.*, 99 (1983), 66928.
- [7] Davies B H, In *chemistry and Biochemistry of Plant Pigments* (Goodwin T. W., Ed.) Vol. 2, Academic Press, New York, 1976, 115.

## Paper-Chromatographic Separation of Plant chloroplast Pigments

Zhao Guiwen Cui Hua Lou siquan Yin Xianglian

*(Department of Applied Chemistry)*

### Abstract

A one-way paper chromatographic method for the separation of chloroplast pigments using the developing solvent system (peroteun ether : chloroform : propanol-[2]=79 : 20 : 1,) has been developed. It provides a complete separation of main pigments including chlorophylls *a* and *b*,  $\beta$ -carotene, lutein, violaxanthin and neoxanthin and a degradation product, chlorophyllide *a* in higher plants.

**Key words:** chloroplast pigment, paper chromatography

# 用于扩展 X 射线吸收精细结构谱仪的 多丝正比室的研制

田 杰 赵淑君 吴岳林 王燕霞

(近代物理系)

## 摘 要

本文介绍了一个用于扩展 X 射线吸收精细结构(EXAFS)谱仪的多丝正比室的研制. 重点讨论了补偿电压与并丝技术的运用对丝室性能的影响. 前、后多丝室最高计数率分别可达  $3 \times 10^6$  计数/秒和  $6 \times 10^6$  计数/秒. 测量结果表明, 室的性能适用于 EXAFS 测量.

关键词: 多丝正比室, X 射线探测, 扩展 X 射线吸收精细结构

中图分类号: O571.1

## 1 前言

近年来扩展 X 射线吸收精细结构(EXAFS)实验已成为研究原子近邻结构的一种有效手段, 并取得了一些有意义的结果<sup>[1]</sup>. 国外的 EXAFS 实验主要在同步辐射加速器上进行, 但有些实验因受测量条件的限制, 在加速器上不能方便地进行. 而采用转靶 X 射线源, 经弯晶聚焦, 光强可达  $10^7$  光子/秒. 虽然它的光强比加速器低 3 个数量级, 但建造和运行方便. 国外已有不少实验室建立了这种 EXAFS 实验系统. 中国科学院物理所与我们协作共同研制了转靶 X 射线源 EXAFS 谱仪, 我们负责研制其中的探测系统部分.

## 2 多丝室的研制

在转靶 X 射线源 EXAFS 谱仪中可以采用透射法测量 EXAFS, 即在吸收样品前安放一个



部分吸收 X 射线的探测器,称为前探测器;在吸收样品后放置一个探测器,称为后探测器,它全部吸收穿过样品的 X 射线. 当入射 X 射线能量为  $8\sim 10\text{keV}$  时,为满足 EXAFS 测量信噪比有最大值,前探测器在入射方向上的吸收长度应约为  $3\text{cm}$ . 为了缩短样品的测试时间,减小统计涨落的影响,要求前后探测器总计数率分别高达  $10^6\sim 10^7$  计数/秒. 此外,X 射线源弯晶聚焦中伴随大约 10%的二次谐波<sup>[2]</sup>,要求探测器在高计数率下有较好的能量分辨率,以便去除二次谐波对测量的影响.

本谱仪使用的前后探测器均为多丝室,它们的结构如图 1、图 2 所示. 前室布丝 19 根,因两侧计 4 根边缘丝不用,所以有效阳极丝 15 根. 每 5 根并一起为一组信号输出,共 3 路信号. 每路信号的最高计数率为  $1\times 10^6$  计数/秒. 后室布丝 136 根,入射方向上第一根边缘丝不用,

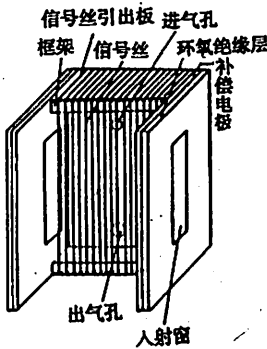


图 1 前室示意图(拆去一侧阴极板框架)

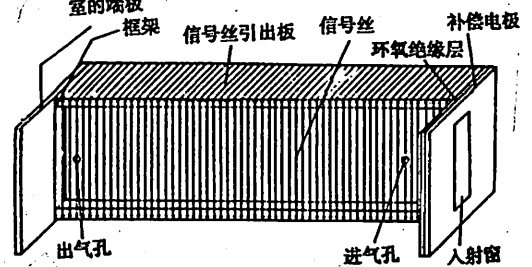


图 2 后室示意图(拆去一侧阴极板框架)

表 1 前后室的主要参数和性能

	前 室	后 室
X 射线入射方向	平行于信号丝平面	平行于信号丝平面
气 体	$90\% \text{Ar} + 10\% \text{CH}_4$	$90\% \text{Ar} + 10\% \text{CH}_4$
气 压	1 个大气压	1 个大气压
机械尺寸	$16 \times 40 \times 32\text{mm}^3$	$24 \times 50 \times 280\text{mm}^3$
极间距离	$2l = 8\text{mm}$	$2l = 12\text{mm}$
丝 距	$S = 1.5\text{mm}$	$S = 2\text{mm}$
丝 径	$d = 15\mu\text{m}$	$d = 15\mu\text{m}$
有效丝数	$n = 15$	$n = 135$
输出信号路数	3	17
运行电压	$-2600\text{V}$	$-3000\text{V}$
坪区电压	$\sim 240\text{V}$	$\sim 200\text{V}$
整个室的能量分辨率 ( $9.666\text{keV}$ X 射线, $1 \times 10^6$ 计数/s)	56%	62%
最高计数率	$3 \times 10^6$ 计数/s	$6 \times 10^6$ 计数/s

有效阳极丝 135 根,分 17 组并丝. 每组并丝的数目是使每路信号的最高计数率为  $1 \times 10^6$  计数/秒(后接的电子学线路可承受  $1 \times 10^6$  计数/秒),共 17 路信号. 前后室的阴极平面用铝板制成. 两室的尺寸与参数如表 1 所示. 转靶 X 光源出射光准直狭缝长为 20mm,宽度可调为 0.2~0.5mm. 为了减少高计数率引起的空间电荷效应<sup>[2]</sup>,X 射线与丝平面平行入射,但这会引入两个不利因素:其一存在边缘计数损失. 一般多丝室边缘 1cm 以内为非均匀电场区,此区域内信号幅度低于正常幅度,对于厚度只有 3cm 的前室,只有中间 1cm 为均匀电场区,这样的室信号幅度差异较大,甚至不能使用;其二,为了提高计数率,采用小丝距的室,如前室丝距  $s=1.5\text{mm}$ ,能量为 10keV 的 X 射线入射会引起多根阳极丝触发,造成小幅度脉冲增加,导致能量分辨率变坏. 为了减小这两个不利因素的影响,我们采取了一些特殊的技术和措施.

2.1 多丝室的边缘补偿

在多丝室结构中加入补偿电极可以减少边缘计数损失. 实验表明,前室补偿电极与工作气体用环氧树脂薄层隔开,加补偿电压后,边缘丝信号幅度开始比较大,得到补偿,但过了一段时间后,信号幅度慢慢下降. 这可能是由于在补偿电极上电荷堆积的原因. 当补偿电极直接与工作气体接触时,加补偿电压后,多丝室容易打火,工作不稳定,所以前室没加补偿电压,两侧边缘丝的信号只好不用.

后室两端加补偿电极,其结构如图 3 所示. 补偿电极与工作气体之间用环氧树脂薄层隔开,与阴极板之间也用环氧树脂薄层隔离,与可调的负高压电源相连. 加补偿电压后,后室工

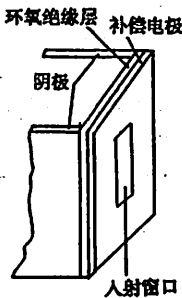


图 3 补偿电极的结构

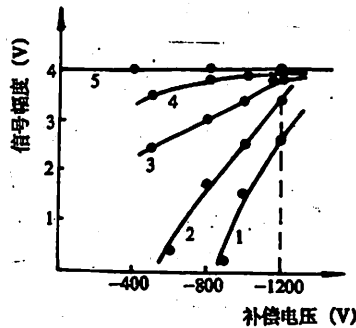


图 4 补偿电压对边缘丝信号幅度的影响

作正常. 当补偿电压升高时,边缘丝的信号幅度增大. 对于一个丝距  $s=2\text{mm}$ 、极间距离  $2l=12\text{mm}$  的后室,当工作电压为  $-3000\text{V}$ (阳极丝通过一个电阻接地,阴极板上加负高压),补偿电压为  $-500\sim-1200\text{V}$  时,边缘几根信号丝幅度改善如图 4 所示. 从图中可以看出,当补偿电压为  $-1200\text{V}$  时,2、3、4、5 号丝幅度基本趋于一致,而无补偿电压时 2 号丝信号幅度基本为零,补偿后起死回生. 1 号丝的幅度虽然得到了补偿,但其能量分辨率(对 5.9keV X 射线)很差,所以不用 1 号丝.

补偿电压还影响阳极丝信号的能量分辨率. 对于一个丝距  $s=1.5\text{mm}$ 、极间距离  $2l=4\text{mm}$ 、丝径  $d=15\mu\text{m}$  的后室,当工作电压为  $-2800\text{V}$  时,靠边缘的第 3 号丝,其信号幅度、能量分辨率(对 5.9keV X 射线)与补偿电压的关系如图 5 所示. 图中直线为输出信号幅度与补偿电压的关系,曲线为能量分辨率与补偿电压的关系. 从图中可以看出,补偿电压为  $-250\text{V}$  至  $-400\text{V}$  之间,输出信号幅度和能量分辨率均可达到丝较满意的结果. 实验表明,不同工作电压

及不同尺寸的多丝室,其补偿电压有不同的最佳范围值。

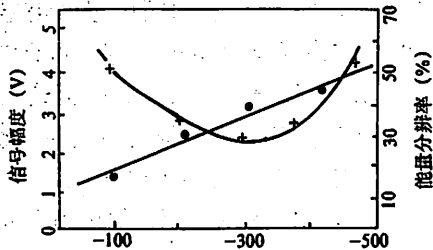


图 5 输出信号幅度、能量分辨率与补偿电压的关系

把幅度差异较大的信号丝并联,能量分辨率不但没有改善,甚至会更差。此外,多丝并联后信号输出端电容增大,信号幅度下降,从而信噪比变差,也会造成能量分辨率下降,针对这种情况,我们采取各丝加串联电位器以便调整改善各丝信号幅度基本一致。这种方法类似模拟加法器,如图 6 所示。实验表明,对于极间距离  $2l = 4\text{mm}$ 、丝距  $S = 1.5\text{mm}$ 、丝径  $d = 15\mu\text{m}$  的室,5 根丝的信号幅度最大相差 20%,直接并联后能量分辨率(对  $5.9\text{keV}$  X 射线)为 60%。采用加串联电位器调整幅度再并丝的方法,其能量分辨率为 45%。值得注意的是这种方法只适用丝与丝之间信号幅度差别很小的情况,对能否在差别大的情况下适用仍须进一步研究。

前置放大器对丝信号能量分辨率影响很大。我们曾用过电压型、电流型、电荷灵敏型三种前置放大器,以电流型为最好。它具有电流增益大、输入阻抗小、上升时间短等特点。

### 3 结果及讨论

用研制的前后室在转靶 X 射线源 EXAFS 谱仪上进行测试。前后室之间放一吸收样品,测量结果是前室最高计数率为  $3 \times 10^6$  计数/秒,后室计数率可达  $6 \times 10^6$  计数/秒。前室平均每根丝的最高计数率为  $2 \times 10^5$  计数/秒(每根丝的受光长度  $2\text{cm}$ ),空间电荷效应不严重。但并丝后前后室的能分辨率变差,如表 1 所示。其原因一方面由于各丝幅度有差异以及并丝后信噪比下降引起的,另一方面由于前后室各信号路的幅度也有差异。它们有相同的下甄别阈和道宽,前室 3 路信号经反符合后相加,后室 17 路信号经反符合后相加,各路放大倍数连续可调以便各路信号进入甄别阈前幅度基本一致,但整个室的能量分辨率还是比单丝差。无二次谐波时对 EXAFS 测量无影响,有二次谐波时,由于少量二次谐波除不掉(能量分辨率低于 50%)影响 EXAFS 测量,计数率越高影响越严重,调节甄别阈可使其影响减到最小。

用上述前后室在中科院物理所 EXAFS 谱仪上测量了镍样品的  $K$  吸收边,如图 7 所示。

### 2.2 并丝对丝室性能的影响及改善措施

由于丝距较小,入射光子会引起多丝触发导致能量分辨率变差,故采取多丝并联输出。从理论上讲,在较高能量下,并丝可以改善能量分辨率。但实际情况并非如此,例如由于机械加工精度所限,引起局部电场畸变;由于丝的直径不均匀,造成同一根丝信号幅度不同;由于布丝时各根丝所受张力的不均匀引起丝周围电场的变化。这些都会造成各丝信号幅度不同。若

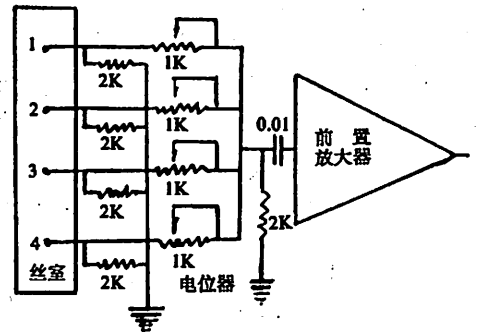


图 6 加串联电位器以改善各丝信号幅度的一致性

它是在用银靶、激发电压为 20keV、激发电流为 200mA 的条件下测量的。从图中可以清楚的看到镍 K 吸收边附近的振荡现象。它比前探测器用正比计数管,后探测器用碘化钠闪烁计数器测量的结果精确。

在 EXAFS 测量中,若用其它方法消除二次谐波,使它不进入前后室,研制一个高计数率的丝室是很有意义的。我们已研制一个极间距离  $2l=8\text{mm}$ 、丝距  $S=1\text{mm}$ 、丝径  $d=15\mu\text{m}$  的密布多丝室,其有效丝 21 根,采取 7 根丝并联,分 3 路输出,经计算其计数率可达  $5\times 10^6$  计数/秒,可望在 EXAFS 谱仪上使用。

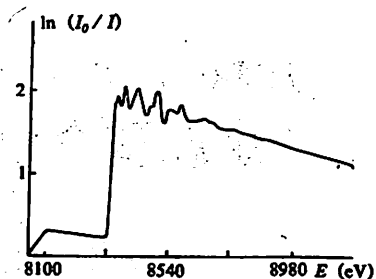


图7 镍的 K 吸收系数与 X 射线能量的关系

### 参 考 文 献

- [1] 陆坤权,同步辐射用于 EXAFS 的研究,中科院物理所论文集,1984 年,p74~86.
- [2] 谢忠信等,X 射线光谱分析,科学出版社,北京,1982,118.
- [3] 唐孝威等,粒子物理实验方法,人民教育出版社,北京,1982,79.

## The Development of the Multiwire Proportional chamber for the Measurement of the Extended X-ray Absorption Fine Structure

Tian Jie Zhao Shujun Wu Yuelin Wang Yianxia

(Department of Modern Physics)

### Abstract

In this paper the development of the multiwire proportional chamber for the extended X-ray absorption fine structure (EXAFS) spectrometer is presented. Emphasis is given to the effects of the compensating voltage and the parallel connection technique of anode wires on the performance of the multiwire proportional chamber. The maximum count rates of the front and rear detectors are  $3\times 10^6$  counts/s and  $6\times 10^6$  counts/s respectively. The experimental results show that the performance of the chamber is adequate for the measurements on EXAFS.

**Key words:** multiwire proportional chamber, X-ray detection, extended X-ray absorption fine structure

# 几种 MOCVD 用挥发性 $\beta$ -二酮类金属螯合物的合成及初步研究

曹传宝 彭定坤 杨萍华 孟广耀

(材料科学与工程系)

张国赏

(结构分析开放研究实验室)

## 摘 要

以丙酮为初级原料,逐步合成频那酮。三甲基乙酸,最后合成了  $\beta$ -二酮螯合剂 DPM,红外光谱鉴定表明合成是成功的。以  $\beta$ -二酮类螯合剂 AA, DPM, TFAA, 及 FOD 与 Y, Ba, Cu, Zr 等中心原子合成了它们的螯合物。热重分析表明,螯合物的挥发性同配体的空间位阻及 F 代原子数目有关,配体的空间位阻越大, F 代原子数目越多,则螯合物的挥发性越好;同时与中心原子的离子半径密切相关,中心原子的离子半径越小,则螯合物的挥发性越好。此外,对几种螯合物进行了质谱研究,以推测它们在 plasma-MOCVD 过程中的可能行为。

关键词:  $\beta$ -二酮螯合物,金属有机化合物,配位化合物合成

中图法分类号: O641.4

## 1 引言

$\beta$ -二酮类螯合剂应用得很早,早期主要用于元素分离和气相色谱<sup>[1,2]</sup>。现在  $\beta$ -二酮类螯合物作为一种广义的金属有机化合物,已经用于 MOCVD 法制备薄膜材料或粉状材料<sup>[3]</sup>。由于 MOCVD 法在材料制备上具有淀积温度低、薄膜质量好的优点,因此对 MOCVD 过程所用的源物质的性能及合成的研究也越来越重要。在高温超导几种 MOCVD 用挥发性  $\beta$ -二酮类金属螯

全物的合成及初步研究研究热潮兴起之后, MOCVD 法制备超导薄膜成为超导的研究的一个重要方面<sup>[4,5]</sup>. 本工作就是针对 Y, Ba, Cu 三种高温超导体组分元素以及 Zr 的  $\beta$ -二酮螯合物进行合成及初步性能的研究。

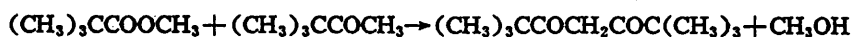
## 2 实验

本工作选用了 AA ( $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{COCH}_3$ ), TFAA ( $\text{CF}_3\text{COCH}_2\text{COCH}_3$ ), DPM ( $(\text{CH}_3)_3\text{CCOCH}_2\text{COC}(\text{CH}_3)_3$ ) 和 FOD ( $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CF}_2\text{COCH}_2\text{COC}(\text{CH}_3)_3$ ) 几种  $\beta$ -二酮螯剂进行螯合物的合成研究。其中螯合剂 DPM 主要为自制, TFAA 和 FOD 是 Fluka 公司的产品, 其余均为国产分析纯试剂。

### 2.1 螯合剂 DPM 的合成

螯合剂 DPM 国内没有产品, 进口试剂价格昂贵, 因而自己合成, 其合成步骤为:

丙酮  $\rightarrow$  频那酮  $\rightarrow$  三甲基乙酸  $\rightarrow$  三甲基乙酸甲酯  $\rightarrow$  DPM



### 2.2 螯合物的合成

分别将  $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{ZrOCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$  溶于适量的 50% 的乙醇水溶液中,  $\text{Y}_2\text{O}_3$  先用  $\text{HNO}_3$  溶解后蒸至近干, 溶于适量的 50% 的乙醇水溶液; 等当量的螯合剂溶于适量的乙醇溶液, 加入等当量的  $\text{NaOH}$  乙醇溶液。两种溶液在搅拌下混合, 长时间搅拌后产生沉淀, 加入大量水, 将析出的固体抽滤, 用  $\text{P}_2\text{O}_5$  干燥后保存。

### 2.3 产物的鉴定

用岛津 IR-440 红外光谱仪分析产物的红外光谱。岛津 TA-30 型热分析仪测量螯合物的热重及差热曲线, 测量条件为空气气氛, 气体流速 80-90ml/min, 升温速率  $10^\circ\text{C}/\text{min}$ 。英国产 ZAB-HS 型质谱仪对螯合物进行质谱分析, 进样方式为 EI 源(电子轰击型离子源)进样, 轰击能量为 70eV 的标准能量。

## 3 结果与讨论

### 3.1 DPM 合成的关键

合成后的 DPM 红外光谱(图 1)同标准红外谱图比较, 二者极为相似, 仅有少数峰的强度略有不同, 证明合成是成功的。

DPM 的合成路线长、步骤多, 其成功的关键在于保持各步处于干燥状态, 特别是频那酮的合成需在无水条件下进行, 其余各步也是试剂含水越少则成功率越高。

### 3.2 螯合物合成

$\text{Cu}(\text{AA})_2$  为兰色粉末,  $\text{Ba}(\text{TFAA})_2$  为桔红色粉末, 其余螯合物产品均为白色或微黄色粉末。产物经红外光谱鉴定, 发现配体相同的螯合物具有相似的红外光谱, 图 2 至图 5 列出了有代表性的  $\text{Cu}(\text{AA})_2$ 、 $\text{Y}(\text{DPM})_3$ 、 $\text{Ba}(\text{TFAA})_2$  及  $\text{Ba}(\text{FOD})_2$  的红外光谱。同标准谱图比较,  $\text{Cu}(\text{AA})_2$  与标准谱完全一致<sup>[6]</sup>, 其余产品因没有标准谱图, 则同类似的参照物比较, 可以证明螯合物的合成是成功的。

螯合物合成成功与否在于合成过程中碱量的控制。pH 值控制不当, 则合成可能会失败或

产率很低。

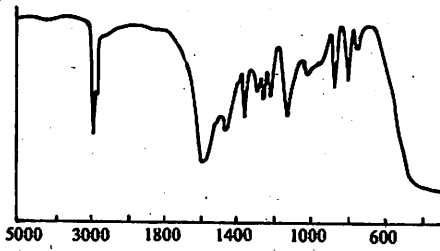


图 1 DPM 的红外光谱图

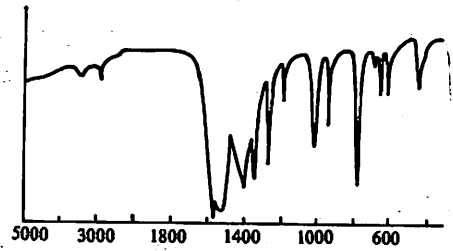


图 2 Cu(AA)<sub>2</sub> 的红外光谱图

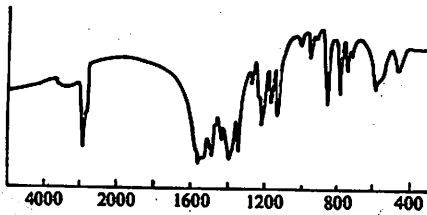


图 3 Y(DPM)<sub>3</sub> 的红外光谱图

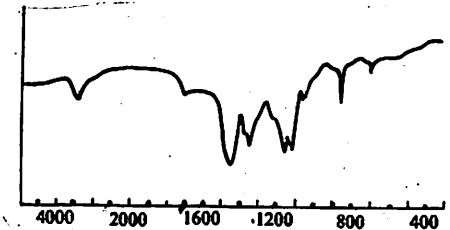


图 4 Ba(TFAA)<sub>2</sub> 的红外光谱图

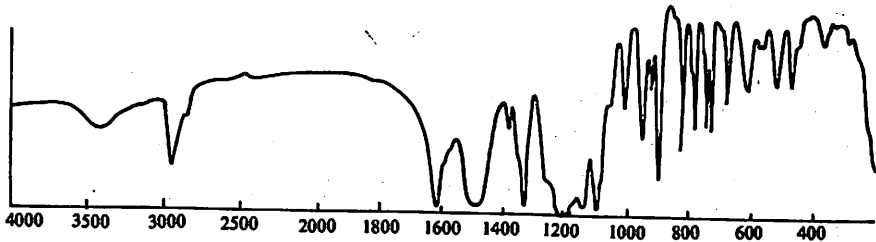


图 5 Ba(FOD)<sub>2</sub> 的红外光谱图

### 3.3 螯合物的热重研究

螯合物的挥发性及热稳定性是 MOCVD 源物质需要考察的主要性质,该项性质决定了它们的使用场合. 表 1 列出了螯合物的热重分析结果. 可以看出,挥发性最好的是 Cu(AA)<sub>2</sub>、Cu(DPM)<sub>2</sub>、Y(DPM)<sub>3</sub> 和 Zr(DPM)<sub>4</sub>, 它们的失重率均在 90% 以上, 其次是 Ba(FOD)<sub>2</sub>, 它的失重率达到 85%, 除 Ba(AA)<sub>2</sub> 的失重率较低外, 其余螯合物的失重率都在 60% 左右. 从失重率, 我们可以总结出两条规律: 从配体方面说, 增加配体的空间位阻或以 F 原子取代 H 原子, 可以改善螯合物的挥发性, 其中以 F 取代 H 效果更为显著, 如 Ba 螯合物的挥发顺序为 Ba(AA)<sub>2</sub> < Ba(DPM)<sub>2</sub> < Ba(TFAA)<sub>2</sub> < Ba(FOD)<sub>2</sub>; 从中心螯合原子方面来说, 中心原子的离子半径越小, 则螯合物越易挥发, Y、Ba、Cu、Zr 的离子半径分别为 Y<sup>3+</sup>0.893、Cu<sup>2+</sup>0.72、Ba<sup>2+</sup>1.34、Zr<sup>4+</sup>0.79, 其大小顺序为: Cu<sup>2+</sup> < Zr<sup>4+</sup> < r<sup>3+</sup> < Ba<sup>2+</sup>, 而它们的螯合物的挥发顺序则为 Cu(AA)<sub>2</sub> > Zr(AA)<sub>4</sub> > Y(AA)<sub>3</sub> > Ba(AA)<sub>2</sub> 和 Cu(DPM)<sub>2</sub> > Zr(DPM)<sub>4</sub> > Y(DPM)<sub>3</sub> > Ba(DPM)<sub>2</sub>, 可见, 在配体相同的情况下, 挥发性与中心原子的离子半径成反相关. 由此, 我们可以推测 Ca、Sr 的螯合物的挥发性

应优于Ba的同一种配体的螯合物,这对于我们寻找合适的螯合剂具有一定的指导意义.

表1 螯合物热重分析结果

样品	样品重(mg)	失重量(mg)	失重率(%)	失重温度(°C)
Cu(AA) <sub>2</sub>	13.23	12.07	91.23	190-270
Y(AA) <sub>3</sub>	15.18	9.12	60.07	200-420
Ba(AA) <sub>2</sub>	9.51	4.00	42.06	200-450
Zr(AA) <sub>4</sub>	5.60	3.62	64.67	120-350
Cu(DPM) <sub>2</sub>	12.01	11.86	98.6	100-290
Y(DPM) <sub>3</sub>	10.16	9.40	92.5	150-250
Zr(DPM) <sub>4</sub>	5.00	4.74	94.80	220-320
Ba(DPM) <sub>2</sub>	20.60	11.90	57.77	200-500
Ba(FOD) <sub>2</sub>	21.80	18.00	85.71	220-300
Ba(TFAA) <sub>2</sub>	19.75	12.80	62.80	150-500

### 3.4 螯合物的质谱分析

我们对Cu(AA)<sub>2</sub>、Cu(DPM)<sub>2</sub>、Y(DPM)<sub>3</sub>、Ba(DPM)<sub>2</sub>、Ba(FOD)<sub>2</sub>和Zr(DPM)<sub>4</sub>几种螯合物进行了质谱研究.用电子轰击离子源进样,其环境同等离子体辅助的化学气相淀积有某些相似之处,对我们推测螯合物在等离子体环境中的行为具有一定的帮助.

对质谱图逐峰解析是一项复杂的工作,表2列出了质谱图中碎片峰及解析的结果.

表2 螯合物的质谱分析结果

样品	离子质量	离子丰度	解析结果
Cu(AA) <sub>2</sub>	57	12	CH <sub>3</sub> COCH <sub>2</sub>
	85	70	CH <sub>3</sub> COCH <sub>2</sub> CO
	100	55	CH <sub>3</sub> COCH <sub>2</sub> COCH <sub>2</sub>
	261	37	Cu(AA) <sub>2</sub>
Cu(DPM) <sub>2</sub>	28	45	CO
	32	14	O <sub>2</sub>
	57	83	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> C
	127	35	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CCOCH <sub>2</sub> CO
	189	39	Cu(DPM) <sub>2</sub> - C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
	315	100	Cu(DPM) <sub>2</sub> - 2C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
	372	57	Cu(DPM) <sub>2</sub> - C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
	429	21	Cu(DPM) <sub>2</sub>



续表 2

样品	离子质量	离子丰度	解析结果
Y(DPM) <sub>2</sub>	85	10	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CCO
	127	100	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CCOCH <sub>2</sub> CO
	184	25	DPM
	365	75	Y(DPM) <sub>2</sub> - 6CH <sub>3</sub>
	455	100	Y(DPM) <sub>2</sub>
	591	85	Y(DPM) <sub>2</sub> - 3CH <sub>3</sub> - H <sub>2</sub>
Ba(DPM) <sub>2</sub>	57	100	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
	85	85	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO
	127	80	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CCOCH <sub>2</sub> CO
	140	35	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CCOCHCOCH <sub>2</sub>
	193	50	BaOC(CH <sub>3</sub> )CH
Ba(FOD) <sub>2</sub>	69	100	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CC
	127	100	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CCOCH <sub>2</sub> CO
	239	100	CF <sub>3</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> COCH <sub>2</sub> CO
	601	100	Ba(FOD) <sub>2</sub> - (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> COCHCO
	650	100	Ba(FOD) <sub>2</sub> - C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> - HF
Zr(DPM) <sub>4</sub>	57	100	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> C
	85	15	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CCO
	127	80	CH <sub>2</sub> CCOCH <sub>2</sub> CO
	624	10	Zr(DPM) <sub>4</sub> - CH <sub>3</sub>
	639	80	Zr(DPM) <sub>4</sub>

从质谱分析结果可以看出, Ba(DPM)<sub>2</sub> 的碎片峰主要为低质量数的分子碎片, 大质量的碎片峰很少, 其余的分子则含有较多的大质量的碎片, 由此我们可以推测, 在等离子体环境中, Ba(DPM)<sub>2</sub> 是几种螯合物中最易被裂解的一种, 而其余的螯合物在等离子体中裂解需反复的电子轰击, 即所需的电子密度较高. 在我们进行等离子体薄膜合成实验中, 上述推测被完全证实.

#### 4 结论

本文成功地合成了  $\beta$ -二酮类的常用螯合剂 DPM, 代替进口产品, 具有较高的科学和经济价值. 用  $\beta$ -二酮螯合剂 AA、DPM、TFAA 及 FOD 进行了 Y、Ba、Cu、Zr 等元素为中心原子的螯合物的合成, 红外光谱鉴定表明合成是成功的. 热重分析表明 Cu(AA)<sub>2</sub>、Cu(DPM)<sub>2</sub>、Y(DPM)<sub>2</sub>、Zr(DPM)<sub>4</sub> 四种螯合物的挥发均高于 90%, Ba(FOD)<sub>2</sub> 的挥发率为 85%, 这几种螯合物是 MOCVD 的较为理想的源物质. 质谱分析表明, 在电子轰击下, 螯合物是分步离解的. 从螯合物的热重分析可以总结出: 螯合物的挥发性不但同配体有关, 配体的空间位阻越大或 F 代原子越多越有利于螯合物的挥发, 同时与中心原子的离子半径有关, 离子半径越小, 则其螯合物越易挥发.

## 参 考 文 献

- [1] Berg E W, Chiang-Acosta J J, *Anal. Chim. Acta*, 40 (1968), No. 1, 101.
- [2] Fujiraga T, Kawamoto T, Kimoto T, *Talanta*, 23(1976), No. 10, 753.
- [3] Peng D K, Fang Q, Hu K A, Meng G Y, in *Proceeding of 8th International Symposium on Plasma Chemistry*, Tokyo, Japan, 1987, 1142.
- [4] Zhang K, Kwak B S, Boyd E P, Wright A C, Erbil A, *Appl. Phys. Lett.*, 54(1988), No. 4, 380.
- [5] Kanehori K, Sugii N, Fukazawa T, Miyauchi K, *Thin Solid Films*, 182(1989), 265.
- [6] *The Aldrich Library of Infrared Spectra*, edition 3, ed. by Charles J. Pouchert, (1981) Milwaukee, Wisconsin, 332-D.

## Synthesis and Preliminary Study of Some Volatile Metal Beta-Diktonone Chelates

Cao Chuanbao Peng Dingkun Yang Pinghua  
Meng Guangyao Zhang Guoshang<sup>+</sup>

*Department of Materials Science and Engineering*

*(+Center for Structure and Composition Analysis)*

### Abstract

One of the important deta-diktonone ligands, DPM (2, 2, 6, 6-Tetramethyl 3, 5-heptandione), is successfully synthesized. Its IR spectrum agrees exactly with the standard spectrum. By using AA, DPM, TFAA, FOD as ligands and Y, Ba, Cu, Zr as center atoms, several metal beta-diktonone chelates are successfully synthesized. Thermogravimetry analysis indicates that the volatility of chelates is related to the ligand's space block and the number of F atoms. The greater the ligand's space block, the better the chelate's volatility. And the more the F atoms in ligands, the greater the chelate's volatility. It is also found that the chelate's volatility is colselly related to the radius of the center atom. When the center atom's radius decreases, the volatility of chelate increases. In this report, mass spectra of several chelates are also studied.

**Key words:** Beta-diktonone chelate, Metallorganic, Synthesis of coordition compounds

# 暴雨过程环境涡散场能量收支特征

汪 钟 兴

(地球和空间科学系)

## 摘 要

选取伴有低空急流和不伴有低空急流的两个暴雨过程,分别应用涡散场能量收支方程,计算雨区面积—时间平均的能量收支各项量值,给出对流层上(400—100hPa)、中(700—400hPa)、下(1000—700hPa)各层次的涡旋场和散度场动能的源汇特征。了解到两类暴雨过程的散度场动能制造、转换和输送情况是完全相同的,主要差异反映在对流层中、下层的涡旋场动能收支方面,尤其是旋转风动能制造项,两者符号相反。

关键词: 暴雨, 能量收支, 辐散风作用

中图法分类号: P458.121

## 1 引言

能量收支诊断研究有助于揭示各类天气系统发生发展的内在物理过程和动力学机理,故是天气动力学重要研究课题之一。Pearce<sup>[1]</sup>和Kung<sup>[2]</sup>对大尺度系统动能平衡问题早已有过很好的评述。Chen<sup>[3]</sup>在分析北美气旋能量演变时指出辐散风对动能的水平通量散度及动能的制造均有重要意义。最近,Buechler<sup>[4]</sup>等对1975年和1979年4月美国中南部的两次强风暴过程作了详细的涡散场能量收支分析。在国内研究者甚多,例如丁一汇等曾对西太平洋台风<sup>[5]</sup>和季风低压<sup>[6]</sup>的涡散场能量收支作了深入的研究;作者<sup>[7]</sup>也曾对四个不同类型的暴雨过程,给出涡散场能量的转换特征。本文则选取伴有低空急流和不伴有低空急流的暴雨过程的实例,计算其涡散场能量收支时空平均状况。因为长江中下游地区梅雨期暴雨常伴有低空急流,故有人提议以低空急流为主要线索来建立我国暴雨模型。然而,偶尔暴雨发生并不伴有低空急流出现,预报方面也出现漏报现象。比较两类暴雨过程涡散场能量产生、转换和输送特征,可以

加深对非低空急流型暴雨过程机理的认识。

## 2 涡散场能量收支

为分别建立涡散场动能收支方程,应将风场分解为涡流和势流两部分,单位质量空气总动能可表示为

$$k = k_D + k_R + V_R \cdot V_D \tag{1}$$

其中  $k_D = \frac{1}{2}V_D \cdot V_D$  和  $k_R = \frac{1}{2}V_R \cdot V_R$  (2)

在计算有限区域总动能时,需对水平面积为  $A$ ,垂直方向自地面到大气顶体积分,即

$$K = KR + KD + \iint V_R \cdot V_D \tag{3}$$

其中  $K = \iint k$ ,  $KR = \iint k_R$  和  $KD = \iint k_D$ ,

$$\iint = \frac{1}{gA} \iiint dx dy dp$$

总动能时间变率为  $\frac{\partial K}{\partial t} = \frac{\partial KR}{\partial t} + \frac{\partial KD}{\partial t} + \iint \frac{\partial V_R \cdot V_D}{\partial t}$  (4)

DK    DKR    DKD    DVRVD

对全球闭域而言,(3)式右端最后一项为零。对于开域积分形式的涡散场能量收支方程可导出以下形式<sup>[4]</sup>

$$\begin{aligned} \frac{\partial KD}{\partial t} = & \iint -V_D \cdot \frac{\partial V_R}{\partial t} - \left[ \iint -f(v_R u_D - u_R v_D) + \iint -\zeta(v_R u_D - u_R v_D) + \iint -\omega \frac{\partial K_D}{\partial p} \right. \\ & \text{DKD} \quad \text{INTD} \quad \text{Af} \quad \text{Az} \quad \text{B} \\ & \left. + \iint -\omega V_R \cdot \frac{\partial V_D}{\partial p} \right] + \iint -V_D \cdot \nabla \phi + \iint -\nabla \cdot k V_D + \iint -\frac{\partial \omega k}{\partial p} + \iint V_D \cdot F \tag{5} \\ & \text{C} \quad \text{GD} \quad \text{HKD} \quad \text{VF} \quad \text{DD} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial KR}{\partial t} = & \iint -V_R \cdot \frac{\partial V_D}{\partial t} + \left[ \iint -f(v_R u_D - u_R v_D) + \iint -\zeta(v_R u_D - u_R v_D) + \iint -\omega \frac{\partial k_R}{\partial p} \right. \\ & \text{DKR} \quad \text{INTR} \quad \text{Af} \quad \text{Az} \quad \text{B} \\ & \left. + \iint -\omega V_R \cdot \frac{\partial V_D}{\partial p} \right] + \iint -V_R \cdot \nabla \phi + \iint -\nabla \cdot k V_R + \iint V_R \cdot F \tag{6} \\ & \text{C} \quad \text{GR} \quad \text{HFR} \quad \text{DR} \end{aligned}$$

图 1 为该两式表示涡散场动能收支各项之间关系示意图。A 为有效位能, KR、KD 和 DKR、DKD 分别表示涡散场动能及其时间变率, VRVD 和 DVRVD 表示相互作用动能及其时间变率, GR 和 GD 分别为旋转风和散度风穿越等压线产生的动能制造或耗散项, HFR 和 HFD 分别为旋转风和散度风对总动能的水平通量散度项, VF 为散度风对总动能的垂直通量散度项, C (KD, KR) 表示涡散场能量的相互转换, 它包括(5)、(6)两式中方括号内 Af、Az、B 和 C 四项, 若

$C(KD, KR) > 0$ , 则表示散度风动能向旋转风动能转换, 若  $C(KD, KR) < 0$ , 则转换方向相反, DR

和 DD 分别为次网格尺度“摩擦”项, 它包括摩擦耗散以及次网格尺度与网格尺度之间的动能交换, 由于该项是作为余差计算的, 因而不可避免地包括计算误差和资料误差在内. 对于全球闭域而言, HFR、HFD、VF 各项均为零; 对于有限区开域而言, 则可视作外源, 而产生项和“摩擦”项可视作内源.

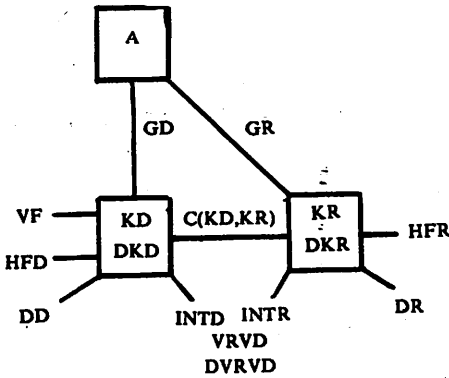


图 1

图 1 中连线指向表示涡散场动能收支状况和转换方向.

### 3 选例及计算方法

本文选取 1986 年 7 月 16—17 日有低空急流暴雨过程(以下简称个例 1)和同年 6 月 11—12 日无低空急流暴雨过程(以下简称个例 2), 计算两个实例中各雨区内两天四个时次涡散场动能收支各项面积—时间平均值, 以了解其能量产生、转换和输送过程的总特征. 这两个实例天气形势概况如下:

个例 1. 该过程发生在西风槽和付热带高压相对较为稳定, 切变线上有两次西南低涡东移, 中、低空有冷空气南下, 且伴有高、低空急流, 低涡移经之处, 鄂、豫、皖、苏、鲁等地普降暴雨.

个例 2. 6 月 11 日 08 时 850hPa 图上, 华南有低空急流, 引起桂东、湘黔部分地区连续性降水, 而长江中下游则风速较弱, 平均不超过 8 米/秒, 贵阳、长沙、安庆和杭州一线为暖切变, 其上有中尺度低涡生成, 以后不断东移, 沿途鄂、皖、苏等地连降暴雨. 该过程始终没有低空急流形成, 也无边界层内超低空急流现象.

计算(5)、(6)两式涡散场能量收支方程各项时, 首先输入 54 个探空站八个标准层资料, 再用拉格朗日法垂直插出 10 层, 即  $\Delta p = 100\text{hPa}$ . 然后用线性拟合方法求得 54 个测站所组成的 84 个三角形中心的涡度和经过 O'Brien 法修正的散度和垂直速度值, 再以权重函数法将它们插到  $1^\circ \times 1^\circ$  经纬度的网格点上(区域为  $24^\circ\text{N} - 40^\circ\text{N}, 106^\circ\text{E} - 121^\circ\text{E}$ ), 由此按常规方案解泊松方程求得各等压面上的速度势和流函数, 再取中央差求得涡流和势流运动分量  $V_R$  和  $V_D$ , 最后对气压层垂直积分得到涡散场能量收支方程各项各层次雨区时空平均值(时间取中央差).

### 4 雨区内涡散场动能收支时空平均特征

图 2(a, b, c)和图 3(a, b, c)分别是两个实例雨区面积—时间平均各层涡散场能量方程各项收支状况. 比较可见, 对于旋转风和散度风动能的源汇而言, 在对流层上层两例定性方面完全相同, 即散度风动能的主要能源是散度风制造项和次网格尺度的反馈能量, 其次是大尺度上升运动向上的动能输送以及涡旋场动能的转换. 而旋转风动能的主要能源是旋转风制造项, 即旋转风在高层穿越等压线, 对气压场做功, 增加旋转风动能, 这种旋转风的非地转性质在

上层特别明显,约为散度风制造项的两倍多,其次是次网格尺度系统的能量反馈,其中又以散度风对散度风动能的反馈作用较大,即  $DD > DR$  (个例2相反)。主要能汇则是旋转风的动能

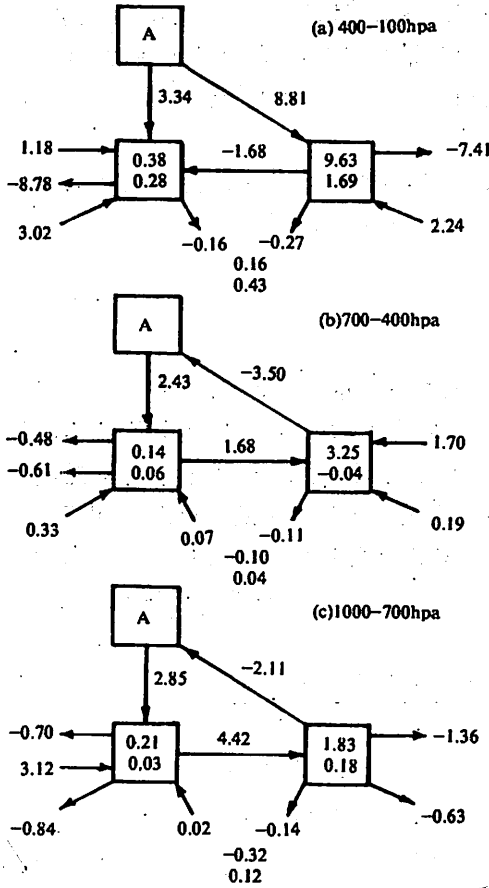


图2 个例1 两区面积-时间平均分层涡散场能量方程收支状况 (KR, KD 和 VRVD 单位为  $10^5 J/m^2$ , 其余单位为  $W/m^2$ )

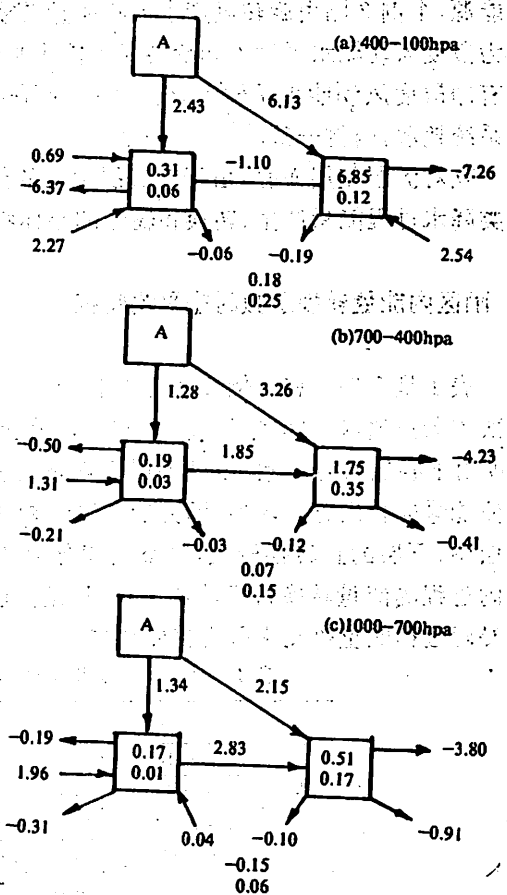


图3 个例2 两区面积-时间平均分层涡散场能量方程收支状况。(单位同图2说明)、

输出和能量转换项。(相互作用项及其时间变率很小,以下讨论从略)。总之,在对流层上层旋转风和散度风共同制造动能,又共同向四周环境输出动能,这种能量生消过程进行得比对流层中、下层剧烈。在对流层中层,个例1的散度风动能能源为散度风制造项和次网格尺度系统的反馈能量,能汇则是向旋转风动能的转换以及散度风动能的水平输送和垂直输送。旋转风动能的能源为旋转风动能水平输送,散度风动能的转换以及反馈能量,唯一能汇是旋转风反抗气压强场做功消耗动能,由于它的作用大于散度风制造项,故两者总和效果是消耗动能的。个例2的散度风动能能源是散度风制造项和散度风动能水平输送,主要能汇是转换给旋转风动能,供给次网格尺度系统能量和向上垂直输送能量。旋转风动能的能源为旋转风动能制造项和散度风动能的转换,能汇则是旋转风动能的水平输出和向次网格系统的能量供给。在对流层下层,

就散度风动能的源和汇而言,两例定性完全相同,即主要能源是散度风产生项和散度风动能水平输送,能汇则是向旋转风动能的转换,大尺度运动向上动能输送和给次网格系统的能量耗散.但对于旋转风动能源汇而言,旋转风产生项两例反号,转换项成为个例 1 旋转风动能的唯一能源,个例 2 则由旋转风产生项和能量转换项为能源,然后向四周环境水平输出.两例虽然同为散度风动能水平输入和旋转风动能水平输出,但综合效果两例不同,即个例 1 在对流层低层有净散度风动能水平输入,而个例 2 则有净旋转风动能水平输出.至于旋转风动能向次网格系统耗散,两例一致.

就对流层整层而言,由于对流层上层的能量收支是主导,大致决定整层能量收支状况,故两类降水过程能量产生、转换和输送的整体特征基本上是相同的.(图略)

## 5 雨区内能量转换函数时空平均特征

表 1 是个例 1 和个例 2 对流层上、中、下层能量转换函数各项量值,四个分项中  $A_f$  项在各层次均为正值,  $C$  项均为负值,  $A_z$  和  $B$  项在上层为负,中下层为正,故两项整层积分值甚小,而  $C$  项由于各层符号一致,虽就各层而言量值较小(对流层中层除外),但整层作用不可忽视,它促使能量向相反方向转换,即由旋转风动能转换为散度风动能.就能量转换函数而言,由于对流层中、下层的正转换较强,故整层积分值还是由散度风动能向旋转风动能转换.总之,两类暴雨过程的能量转换特征非常一致,只是强弱有别,而且由上节可见,这种能量转换过程在整个暴雨过程能量收支中占有重要地位.

表 1 对流层各层能量转换函数各项的量值 (单位:  $w/m^3$ )

	层 次	$A_f$	$A_z$	$B$	$C$	$C(KD, KR)$
个 例 1	400—100	2.79	-2.11	-2.27	-0.09	-1.68
	700—400	1.63	0.36	0.79	-1.10	1.68
	1000—700	2.32	1.68	0.91	-0.49	4.42
	1000—100	6.74	-0.07	-0.57	-1.68	4.42
个 例 2	400—100	2.12	-1.42	-1.35	-0.45	-1.10
	700—400	1.78	0.29	0.72	-0.94	1.85
	1000—700	1.33	1.01	0.82	-0.33	2.83
	1000—100	5.23	-0.12	0.19	-1.72	3.58

## 6 结语

综上所述,对于伴有低空急流和不伴有低空急流两类暴雨过程,其能量产生、转换和输送特征有如下异同点:

就散度风动能的源和汇而言,在对流层各分层次较为一致,即由有效位能转换给散度风动能,充分说明上下层的耦合关系十分密切.在对流层上层,它与大尺度上升运动输送来的能量和次网格系统反馈的能量一起向四周环境水平输出,而在对流层下层则与散度风动能输入部分一起将得到的动能转换给旋转风动能.两例主要差异反映在对流层中、下层旋转风动能的能量收支方面,个例 2 的旋转风制造项为正,即旋转风穿越等压线对气压场做功,产生涡旋场

动能,然后水平输送给四周环境大气;而个例1则旋转风制造项为负,即消耗涡旋场动能,不仅如此,在对流层中层其旋转风能量的消耗超过散度风能量的制造,结果造成总动能的消耗,它依靠旋转风动能的水平输入及次网格系统反馈能量来补充.

两类暴雨过程,在对流层上层以正压过程为主导,而在对流层中、下层,个例1以斜压性为主导,个例2则正压、斜压过程共同制造动能.这种旋转风非地转性质的差异反映了不同的风压场扰动结构,而它们又与风场的非线性作用过程直接有关.

### 参 考 文 献

- [1] Pearce R P., *Q. J. R. M. S.*, 100 (1974), 265—285.
- [2] Kung E C, Smith P J, *Bull. Amer. Met. Soc.*, 55(1974), 768—777.
- [3] Chen T C, Alpert J C and Schlatter T W, *Mon. Wea. Rev.*, 106 (1978), 458—468.
- [4] Buechler D E and Frelberg H E, *Mon. Wea. Rev.*, 114 (1986), 95—114.
- [5] 丁一汇等,中国科学(B),1985,第10期,959—966.
- [6] 丁一汇等,热带气象,3(1987),第1期,20—29.
- [7] 汪钟兴,大气科学,18(1992), No. 6.

## The Characteristics of Budget for Divergent and Rotational Components of Kinetic Energy in Heavy Rain Processes

Wang Zhongxing

(Dept. of Earth & Space Science)

### Abstract

From budget equations for rotational and divergent components of kinetic energy, the area-time averages of each term are computed for 1000—700, 700—400, and 400—100hPa layers to describe energetics of the lower, middle and upper troposphere for heavy rain cases with and without LLJ. The results show that the generation, conversion and transport for divergent components of kinetic energy are the same and the major differences between the cases are found in the energy budget of rotational component in lower and middle tropospheric layers. In particular, the signs of rotational generation (GR) are opposite.

**Key words:** heavy rain, energy budget, effect of divergent wind



# PSD 激光测微仪的研制与精度分析

金泰义 李胜利 徐育 郦明

(精密机械与仪器系)

## 摘 要

介绍 PSD 激光测微仪的结构及特点. 根据输入输出参数方程及误差测量结果进行数据处理和误差分离, 确定了仪器的系统误差和随机误差. 这一工作为系统误差补偿和提高仪器测量精度提供了依据.

关键词: 在线检测, 位置敏感元件, 精度分析

中图法分类号: TH74

## 1 前言

在生产过程中, 产品质量检测与监控是保证产品质量使生产处于最佳状态的技术手段. 目前发达国家已广泛运用在线检测对加工中产品质量进行实时检测与控制. 我国在生产线上的在线检测还处于薄弱环节.

PSD(position sensitive detector)元件在本世纪 70 年代研制成功, 1985 年前后日本和西方国家又相继研制了激光测微仪. 我国于 80 年代末才开始这一研究工作. 1991 年我们成功地研制了 PSD 激光测微仪. 仪器的分辨率达到亚微米级, 精度为  $\pm 3\mu\text{m}$ . PSD 激光测微仪在国内属首创, 技术上处于领先地位, 达到 80 年代国际同类产品水平, 是一种有广泛应用前景的在线检测仪器.

## 2 激光测微仪工作原理及特点

激光测微仪的测头以半导体激光器(LD)为信号源, 信号源发出一定频率的调制光信号,

经透镜(S<sub>1</sub>)聚焦后入射到被测物体表面(A、B点)其散射光信号经透镜(S<sub>2</sub>)聚焦后照射在光电位置敏感元件(PSD)光敏面(D'、B'点)上,转化为光电流 I<sub>a</sub>、I<sub>b</sub> 输出,如图 1、图 2 所示. 根据 PSD 元件特性<sup>[1]</sup>及光学三角法测量原理,被测物体位移 X 与 PSD 感光点位置 Y 有下列对应关系<sup>[2]</sup>

$$Y = (L_2 X \sin \theta) / (L_1 \pm X \cos \theta) \tag{1}$$

$$Y = L(I_a - I_b) / (I_a + I_b) \tag{2}$$

(1)式中 θ 为入射光轴与接收光轴之间夹角, L<sub>2</sub> 为透镜(S<sub>2</sub>)物距, L<sub>1</sub> 为透镜(S<sub>2</sub>)象距. 当被测物体由 A 到 B 位移 X 时,象点相应地由 D' 到 B' 移动 Y. Y 值由(2)式确定, 式中 L 为结构常数(接地点到两输出端距离).

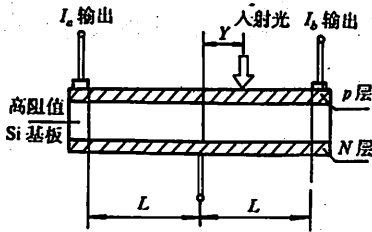


图 1 PSD 构造示意图

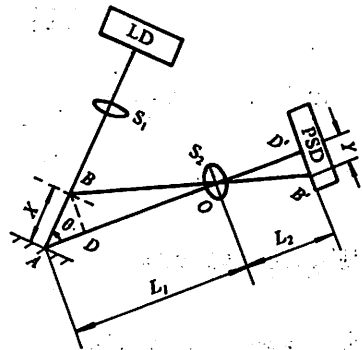


图 2 光学三角法测量原理

激光测微仪由测头和测量信号传输与处理系统组成,如图 3 所示.

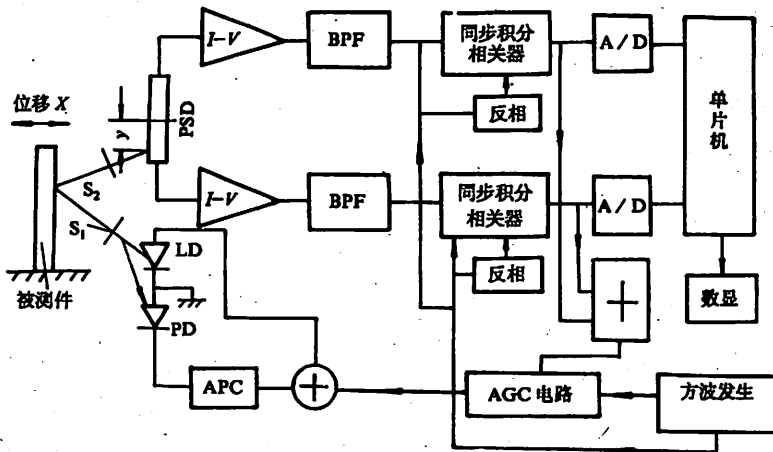


图 3 PSD 激光测微仪光电系统图

测头为机-光-电一体化的小型精密测头,结构原理为图 4 所示. 信号传输与处理系统由前置放大、带通滤波、同步积分、A/D 转换与单片机组成. 具有以下特点:

- (i) 测头为独立工作单位. 用单测头可以测量物体的位移、振幅和单向尺寸精度;用双测

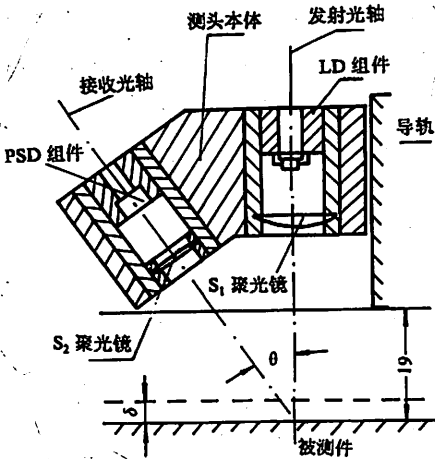


图 4 测头结构原理图

头可以测量物体厚度;用三个测头可以测量物体的直径。测头与运动机构组合可以对物体进行扫描测量。

(ii) 根据需要测头可以离开物体 0~100mm 以上对物体进行非接触式测量,适于测量纸张、金属、非金属型材尺寸精度。

(iii) 由于半导体激光器发出的光信号频率是经过调制设定的,所以测量系统主信号频率也是一定的,它通过中心频率与调制频率相同的带通滤波器、同步积分器、相关器,能有效地抑制照明光、杂散光以及电噪声热噪声的干扰。

(iv) 由于对电路版进行了精心的设计和加工,作了特殊防护处理,整机调试时,测微仪重复精度

高、稳定性好、温飘也很小。

### 3 激光测微仪的精度分析

#### 3.1 测量系统原理误差分析

(1) 式所表示的输出与输入参数关系为非线性函数关系,用它来描述线性系统必然产生原理误差,作为一种系统误差将影响仪器精度的变化规律。用最小二乘法拟合后其非线性误差为 1.1%,如图 5 所示。

#### 3.2 测头结构尺寸加工误差分析

测头结构尺寸有公差( $\theta = 30^\circ \pm 30''$ 、 $L_1 = L_2 = 40 \pm 0.02$ ),它们对精度的影响程序可由(1)式导出:

$$\frac{\partial Y}{\partial L_1} = - \frac{L_2 X \sin \theta}{(L_1 \pm X \cos \theta)^2} \quad (3)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial L_2} = \frac{X \sin \theta}{L_1 \pm X \cos \theta} \quad (4)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \theta} = - \frac{L_2 X (L_1 \cos \theta \pm X \cos^2 \theta - X \sin^2 \theta)}{(L_1 \pm X \cos \theta)^2} \quad (5)$$

$$dY = \left| \frac{L_2 X \sin \theta dL_1 + X \sin \theta (L_1 \pm X \cos \theta) dL_2 + L_2 X (L_1 \cos \theta \pm X \cos^2 \theta - X \sin^2 \theta) d\theta}{(L_1 \pm X \cos \theta)^2} \right| \quad (6)$$

(3)、(4)、(5)式为仪器的光机系统精度传递函数式,反映了  $L_1, L_2, \theta$  对精度的影响,并且与被测物位置  $X$  有关。对应于不同的  $X$  值有不同程度的影响。当  $X=0$  时, $L_1, L_2, \theta$  的影响均为 0。当  $X=1$  时: $\frac{\partial Y}{\partial L_1} = -11.976 \times 10^{-3}$ ,  $\frac{\partial Y}{\partial L_2} = 12.235 \times 10^{-3}$ ,  $\frac{\partial Y}{\partial \theta} = -841.6576 \times 10^{-3}$ ,  $\theta$  的影响比  $L_1, L_2$  大一个数量级以上。因此在设计时, $\theta$  的精度要高一些,加工时两光轴夹角  $\theta$  是在光学座标镗床上加工的,精度高满足了仪器的要求。(6)式为光机系统精度方程,可以用它算

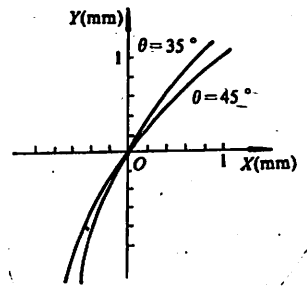


图 5 光学三角法测量原理误差

出结构尺寸公差( $dL_1, dL_2, d\theta$ )共同影响时,对应于  $X$  值的  $Y$  误差大小(物体位移精度). 由(6)式不难算出在  $X = \pm 1\text{mm}$  时,误差最大约为  $4\mu\text{m}$  左右. 因此要设置补偿环,在调整时消除误差.

### 3.3 信号接收转换元件误差分析

(2) 式为 PSD 的转换特性方程,它是基于  $L$  为常数,即光敏面的几何中心与电中心重合,PSD 光敏面为一均匀电阻层,输出电源  $I_a, I_b$  与光点位置  $X$  成比例建立的,如图 1 所示. 实际上电阻层是不均匀的,几何中心与电中心也不重合,输出电源  $I_a, I_b$  非线性误差一般在 1% 左右. 这种非线性误差在输入端产生,将随着信号传输转换按一定传递函数关系传递到终端,引起总输出信号的非线性误差. 可以根据 PSD 的实际误差曲线制作误差补偿电路或软件消除接收元件非线性误差的影响.

### 3.4 信号传输与处理电路误差分析

#### 3.4.1 前置放大电路误差分析

由 PSD 输出的两路电源信号  $I_a, I_b$ , 要转换为两路电压信号  $V_a, V_b$  并得到放大,必须保证  $I_a/I_b = V_a/V_b = K$  (常数)精度不变. 图 6 所示的前置放大电路的转换方程分别是

$$V_a = I_a R_1 + I_{\alpha} R_1 \tag{7}$$

$$V_b = I_b R_4 + I_{\alpha} R_4 \tag{8}$$

式中信号电源  $I_a, I_b$  为微安级,失调电流  $I_{\alpha}$  为纳安级,差三个数量级,若将  $I_{\alpha} R_1, I_{\alpha} R_4$  两项略去,对精度影响甚微. 因为  $R_1 = R_4 = 450\text{k}\Omega \pm 5\%$ , 是金属膜电阻,阻值变化为  $0 \sim 45\text{k}\Omega$ , 误差较大,必须提高其精度来保证转换精度. 一般可以通过测量选取  $R_1 \equiv R_4$  实际值相同的电阻装入电路,这样在工作时就能保证转换精度,即

$$\frac{V_a - V_b}{V_a + V_b} = \frac{I_a R_1 - I_b R_4}{I_a R_1 + I_b R_4} = \frac{I_a - I_b}{I_a + I_b} \tag{9}$$

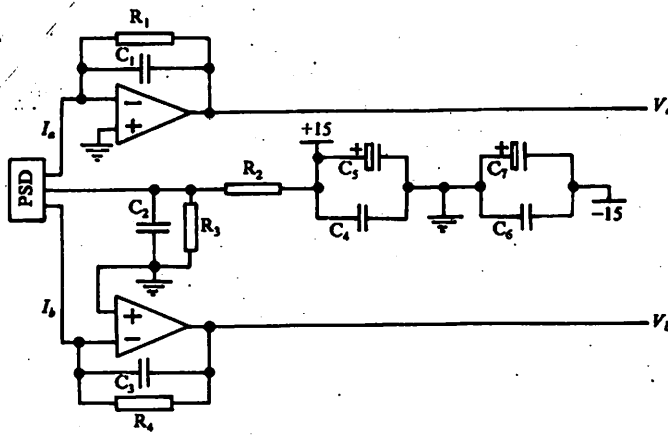


图 6 前置放大电路

#### 3.4.2 测量数据处理电路误差分析

经过放大变换的信号  $V_a, V_b$  将按图 3 所示框图的程序进入后续处理电路. 后续电路的主要作用是消除干扰,提高信噪比及测量精度,一般不会产生较大误差. 为此带通滤波器的主要

作用是消除干扰提高信号噪比。研制中除了使它中心频率与被测主信号频率一致外,同时要求温飘低、线性度好,不影响传输精度。同步积分与相关处理是进一步消除干扰与增强主信号作用,同步积分对测量误差还有平均作用,对提高信号传输精度有利。

模数转换为 12 倍 A/D,主要误差是量化误差。A/D 转换的总电压为 10.24V,最小量化电压为 0.0025V,所以量化误差为 0.012%~0.024%,对精度影响很小。

#### 4 激光测微仪精度的测试与确定

为了正确判断激光测微仪的精度,在调试中以惠普公司双频激光干涉仪(HP5525A 精度为  $10^{-7}$ m)为标准仪器,进行测量数据比对标定。经测试,本文研制的激光测微仪的测量分辨率为  $1\mu\text{m}$ ,示值精度为  $\pm 3\mu\text{m}$ ,重复性精度为 0.12%,线性度为 0.3%。

在调试中,用精度图解法与数据处理法则对全部测试数据进行处理和误差分离,用实验进一步验证仪器精度变化趋势。在  $X=\pm 1\text{mm}$  测量范围内,按 0.1mm 的间距分为 21 个测点,每点测 30 个数据,将全部原始测量数据与惠普公司双频激光干涉仪比对,数据同时输入计算机进行处理。每点以 HP5528A 的数据平均值  $X_0$  为真值,以激光测微仪实测平均值  $\bar{X}_i$  为平均偏差,求出各点的  $\sigma_i$ ,以物体位移精度  $\delta_i$  为纵座标作出  $\bar{X}_i \pm 3\sigma_i$  在  $X=\pm 1\text{mm}$  范围内的曲线,如图 7 所示。根据统计规律,每点测 30 次的平均值  $\bar{X}_i$  应非常接近该点的分布中心  $\bar{X}_0$ ,而各点分布中心  $\bar{X}_0$  的大小主要取决于系统误差的影响程度。故  $\bar{X}_i$  曲线反映了影响仪器精度系统误差变化规律。这种系统误差是仪器的综合系统误差,可以根据  $\bar{X}_i$  的变化规律用电路或软件对仪器进行误差补偿,提高测量精度。 $\pm 3\sigma_i$  曲线主要反映各点随机误差分布宽度, $\sigma_i$  表示随机误差的影响程序,代表各点精密度。

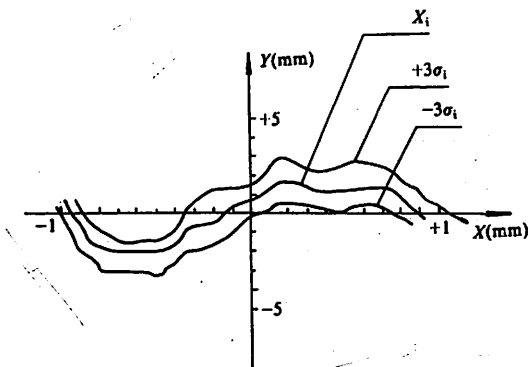


图 7 在  $X\pm 1\text{mm}$  范围内精度图解

综上所述激光测微仪的精度可以用图解法<sup>[3]</sup>定义:“任意一点的平均位置  $\bar{X}_i$  与真值  $X_0$  之差的代数值,与同一点分布宽度  $\pm K\sigma_i$  之和即为仪器在该点精度  $\delta_i$ ”。其表达式为

$$\delta_i = (\bar{X}_i - X_0) \pm K\sigma_i \quad (10)$$

式中  $K=2$  或  $3$ , 或为不确定度。

图 7  $\bar{X}_i$  所表示的仪器综合系统误差变化规律与精度分析时所得到的系统误差综合变化规律很相似。前述光学三角法测量原理误差,与 PSD 元件的非线性误差都是在零点趋近于零,在  $X=\pm 1\text{mm}$  点最大。与调试前实测  $\bar{X}_i$  曲线变化规律一样,在  $X=0$  点最小,在  $X=\pm 1\text{mm}$  点最大。后来通过调整环节将  $X=\pm 1\text{mm}$  时误差消除,所以  $\bar{X}_i$  的变化规律呈现图 7 所示的状况。概括理论和实践都证明精度图解法可以简便适用地将仪器的系统误差与随机误差分离,并为建立仪器精度表达公式及误差补偿提供理论和实验依据。

## 参 考 文 献

- [1] 滨松ホトニクス, テケニカル, データ, 精密测距变位用 1 次元 PSD, 1990 年 1 月.  
[2] Drunk G, Hild N, *Sensor Review*, 10 (1990), 123.  
[3] 市川敏夫, 机械と工具, 1984 年, Vol. 28, No. 6, p73.

## The development of PSD laser Measuring Micro-Displacement Instrument and Its Accuracy Analysis

Jin Taiyi Li Shengli Xu Yu Li Ming

*(Department of Precision Machinery and Instrumentation)*

### Abstract

In this paper, the characteristics and structure of PSD laser measuring micro-displacement instrument are introduced. According to the equation of input and output as well as the error sources, the accuracy of the instrument is analysed. The system error and random error of the instrument are determined by processing the data of measurement results. Based on the above-mentioned analysis, we can compensate for error and improve measurement accuracy of the instrument.

**Key words:** on-line measurement, position sensitive detector, accuracy analysis

# 用瞬态法对竖板封闭夹层内 自然对流换热的研究

## ——双层玻璃窗最佳间距的确定

张寅平 陈则韶 葛新石

(工程热物理系)

### 摘 要

将瞬态卡计法运用于竖板封闭夹层内自然对流换热的研究,得到了分区的无量纲换热准则公式。公式值与文献平均值比较吻合,实验误差小于8.8%。利用所得公式,导出了确定双层玻璃窗最佳间距的方程,并对一些特例给出了计算结果。

关键词: 传热,自然对流,隔热

中图法分类号: TK121

### 1 前言

近年来,建筑物中的采暖与保温问题越来越受到人们的重视。在建筑保温中,空心墙的结构和双层玻璃窗最佳间距是两个有实用价值的传热学研究课题<sup>[1]</sup>。在英国,双层玻璃窗的最佳间距(通过窗户热损最小的双层玻璃间距)普遍取为1.9cm, Bachelor 则认为应该取在2.5cm。在我国,我们尚未发现这方面的研究结果报道。

研究空心墙的结构对换热的影响及确定双层玻璃窗最佳间距的关键是确定竖板封闭夹层内的自然对流换热规律。

竖板夹层内的自然对流换热,是个经典的传热学问题。前人已做了大量的工作,得到了许多准则公式,但令人不能满意的是用它们来计算同一个竖板夹层内的自然对流换热,不仅所得结果有时相差甚远,而且一些准则公式形式上的差别,导致了相悖的结论<sup>[2]</sup>。因此,正如 Arnold<sup>[3]</sup>1976年指出的,这方面的问题仍有必要做进一步的研究。

在竖板封闭夹层内自然对流的研究方法上,就我们所知,几乎都是采用稳态法。近年来,葛新石在水平封闭夹层内自然对流的研究中提出了瞬态法,并获得了令人满意的结果<sup>[4]</sup>。在此基础上,我们结合竖板夹层内自然对流换热的特点,对该方法做了一些改进,使之适用于竖板封闭夹层内自然对流的研究。

## 2 瞬态法实验

### 2.1 实验原理

竖板封闭夹层模型如图1(a)所示。1板温度为 $T_1$ 并保持恒定;2板为铜板,热容为 $mc_p$ 。当其被加热时, $T_2$ 连续上升,2板对1板的对流换热也将连续改变。每一定板间温差的换热过程都是瞬态过程,故称之为瞬态法。

取虚线框为控制容积,可写出瞬态过程的能量平衡方程:

$$Q = mc_p \frac{dT_2}{d\tau} + Q_r + Q_c + Q_L \quad (1)$$

其中, $Q_r$ 为辐射换热热量, $Q_c$ 为对流换热热量,且等于 $hA \cdot (T_2 - T_1)$ , $A$ 为1板或2板的面积; $Q_L$ 为边缘热损; $Q$ 为加热功率。

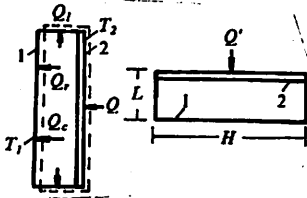


图1 竖直、水平矩形封闭空间内传热示意图

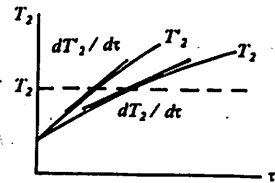


图2  $T_2(T'_2) - \tau$  关系曲线

将图1(a)中的单元逆时针旋转 $\pi/2$ ,如图1(b)所示。设此时加热功率为 $Q'$ ,1板温度仍为 $T_1$ ,2板温度沿板均匀,为 $T'_2$ 。由于热面在上,冷面在下,故自然对流不发生。能量平衡方程为

$$Q' = mc_p \cdot \frac{dT'_2}{d\tau} + Q'_r + Q'_L + KA \cdot \frac{\Delta T'}{L} \quad (2)$$

“'”表示热板水平放置时各量的上标。 $\Delta T' = T'_2 - T_1$ , $K$ 为空气的导热系数。联立式(1)、(2),并注意到 $T_2 = T'_2$ 时, $Q_r = Q'_r$ ,得

$$h = \left[ mc_p \left( \frac{dT'_2}{d\tau} - \frac{dT_2}{d\tau} \right) + \frac{K}{L} A \Delta T' + (Q - Q' + Q'_L - Q_L) \right] / (A \cdot \Delta T') \quad (3)$$

只要测出等式左边的各量, $h$ 就可依据上式算出。见图2。

为保证主加热板在水平、竖直放置时加热板温度均匀,加热板背面自上至下布置了三板加热丝,其加热功率可分别调节。加热板正面布置了

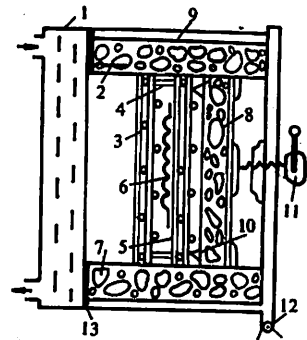


图3 实验装置

- 1 水冷铜板; 2 热流计片; 3 加热铜板; 4 加热丝
- 5 补偿加热板; 6 热电堆; 7.8 隔热层; 9 木框架
- 10 隔热垫; 11 可调螺杆; 12 旋转点; 13 密封胶



九对铜—康铜热电偶,用以测量加热板不同时刻的温度并监视板温的均匀性.在主加热板与补偿加热板之间放有热电堆,热电堆接温控仪,使得主、辅加热板同步升温,从而使主加热板背部热损很小.

水冷板中通自来水.板上均匀布置的五对热电偶示值表明:实验中,板温的不均匀性及温度波动小于 0.5K.

为检测边缘热损,实验段周壁布置了热流计片.实验过程中,矩形空间用塑料胶带密封,可认为无泄漏问题.

## 2.2 测试及数据处理说明

(i)实验中,为使加热板在水平和竖直放置时温度均匀,首先应使三根加热丝功率匹配.

(ii)实验中,虽然  $T^*$  ( $T^* = (T_1 + T_2)/2$ ) 变化范围不大 ( $< 30K$ ),但我们认为,以往很多文献在处理实验结果时,把物性当成常量是欠妥的.理由见表 1,其中,  $\beta$  为气体膨胀系数,  $L$  为气体粘性系数,  $K$  为导热系数,  $Gr_L$  为葛拉晓夫数.

表 1 空气物性随温度变化范围表

$T^*$ (K)	$\beta(1/K)$	$\nu \times 10^6 (m^2/s)$	$K(W/m \cdot s)$	$ \Delta\beta /\beta$	$ \Delta\nu /\nu$	$\Delta K/K$	$\frac{\Delta Gr_L}{Gr_L}$
300	$3.3 \times 10^{-3}$	15.9	$26.3 \times 10^{-2}$	---	---	---	---
350	$2.9 \times 10^{-3}$	20.9	$30.0 \times 10^{-2}$	14%	32%	14%	51%

因此我们在处理实验数据时,对物性采取了线性插值.

## 3 准则公式及结果讨论

### 3.1 准则公式的导出

当  $L/W \leq 0.2$  时,封闭竖板夹层内的自然对流无量纲准则公式可表示成<sup>[5]</sup>

$$Nu_L = C \cdot Gr_L^n \cdot (H/L)^m \quad (4)$$

Jacob 等<sup>[6]</sup>在由实验数据拟合准则公式时认为:竖板封闭夹层内的自然对流放热也象大空间竖板自然对流放热一样,  $m$  要么是层流时的 1/4,要么是湍流时的 1/3.然后再由实验点定出  $n, c$  的值及湍流的起始点.这种做法带有先验性,因此不是十分妥当的. Emery<sup>[7]</sup>, Catton<sup>[8]</sup>等在拟合实验数据时,没有区别对流换热在层流和湍流时的不同特点,分别将  $Gr_L$  在  $10^3 \sim 10^7, 10^8 \sim 10^{10}$  区间内的实验数据拟合成单一的准则公式,这样的处理,抹煞了层流与湍流的特点,不能反映竖板封闭夹层内自然对流的一些细微换热性质,因而也是不妥当的.我们在拟合实验数据时,注意到它们的特点,即在  $\Delta T$  一定时,  $h$  与  $Gr_L$  的关系先呈递减,后呈递增,转折点在  $Gr_L = 3.7 \times 10^5$  附近<sup>[2]</sup>.我们以  $Gr_L = 3.683 \times 10^5$  的实验点为界,将实验数据分两部分拟合.在每一部分,采用最小二乘法拟合,求出  $m, n, c$  的值,并以此为依据.在对数坐标纸上,分别绘出  $(\lg Nu_L - m \lg Gr_L) \sim \lg(H/L)$  和  $[\lg Nu_L - n \lg(H/L)] \sim \lg Gr_L$  图,剔出粗差点,再将数据用最小二乘法拟合,最后得到:层流区,  $m = 0.241, n = -0.207, c = 0.301$ ;湍流区,  $m = 0.354, n = -0.201, c = 0.069$ .显然,层流区和湍流区  $m$  值明显不同,但  $n$  值十分相近.考虑到实验误差和实际使用方法,将上述  $m, n, c$  值在 1% 精度范围内调整,得到:

层流区

$$Nu_L = 0.30 \cdot Gr_L^{0.24} \cdot (H/L)^{-0.20} \quad \begin{matrix} 4500 \leq Gr_L \leq 5.6 \times 10^5 \\ 10 \leq H/L \leq 40 \end{matrix} \quad (5)$$

湍流区

$$Nu_L = 0.070 \cdot Gr_L^{0.35} \cdot (H/L)^{-0.20} \quad \begin{matrix} 5.6 \times 10^5 \leq Gr_L \leq 1.5 \times 10^6 \\ 6.67 \leq H/L \leq 10 \end{matrix} \quad (6)$$

当式(5)、式(6)中的  $Nu_L, Gr_L, (H/L)$  相等时,可求出转折点的  $Gr_{L0} = 5.6 \times 10^5$ ,即图 4 中的  $\lg Gr_{L0} = 5.75$  点.

3.2 实验结果和准则公式讨论

$h$  的最大相对误差为 8.8%;拟合公式的最大相对偏差为 5.2%,剩余均方差为 0.071.

本文及各文献值与文献平均值的比较见表 2.

从表 2 中可以看出,本文准则公式值与文献平均值的最大相对偏差较小.

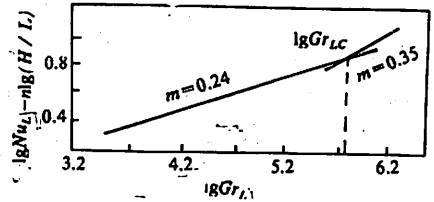


图 4  $\lg Nu_L - n \lg(H/L) \sim \lg Gr_L$  关系曲线

表 2 本文准则公式值与文献值的比较

参考文献号	[4]	[5]	[6]	[7]	[8]	[9]	[10]	[11]	[12]	[13]	[14]	本文
最大相对偏差(%)	24.5	32.1	7.53	11.7	3.43	25.9	24.4	18.9	16.1	20.2	36.2	12.6

3.3 对流最佳间距的确定

对周壁绝热、两换热面温度均匀的竖板封闭夹层,对流换热热流密度  $q'' = h\Delta T = (Nu_L \cdot K/L) \cdot \Delta T$ ,当  $\Delta T, H$  一定时,由式(4)可以导出:

$$q'' = c_1 \cdot Gr_L^{(n-\frac{n+1}{3})}, c_1 \text{ 为常数} \quad (7)$$

$$dq''/dGr_L = c_1/3 \cdot (3m - n - 1) \cdot Gr_L^{(n-1-\frac{n+1}{3})} \quad (8)$$

将准则公式(5)、(6)代入上式,得

$$dq''/dGr_L = \begin{cases} < 0 & Gr_L < Gr_{L0} \\ > 0 & Gr_L > Gr_{L0} \end{cases} \quad (9)$$

显然,  $q''$  在  $Gr_L = Gr_{L0}$  处达最小值. 这表明在竖板封闭夹层内,自然对流的热流密度的最小值出现在其间介质流态从层流变到湍流的转折点上. 藉此,我们求得了不同温度下的最佳间距  $L_c^*$ .

$$L_c^* = [Gr_{L0} \cdot v^2 / (\beta g \cdot \Delta T)]^{1/3} \quad (10)$$

取  $T^* = 300K, g = 9.8m/s^2$ , 上式化简为

$$L_c^* = 0.16 / \sqrt[3]{\Delta T} \quad (11)$$

不同的  $\Delta T$  下的  $L_c^*$  见表 3.

表 3 不同  $\Delta T$  下的  $L_c^*$  值

$\Delta T(K)$	20	30	40	50	60
$L_c^*(cm)$	5.9	5.2	4.7	4.3	4.1

### 4 实际问题中的竖板夹层换热讨论

在建筑保温中,有关封闭夹层换热的例子很多,其中两个典型的例子是空心墙及双层玻璃窗. 它们中的空腔几何尺寸直接影响换热效果,从而直接影响建筑物的保温性能. 因此,对于实际问题中的竖板封闭夹层,讨论一下几何结构对换热的影响并指出最佳尺寸,是很有实用价值的.

由于我们得到的准则公式的实用范围限于:  $6.67 \leq H/L \leq 40$ 、 $4.5 \times 10^3 \leq Gr_L \leq 1.5 \times 10^6$ , 因此,讨论只在这一范围内进行.

#### 4.1 竖板封闭夹层中加水平隔层对换热效果的影响

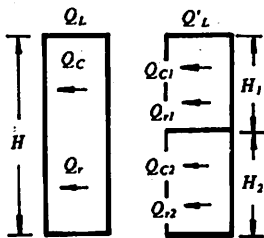


图 5 空腔换热关系图

见图 5. 当空腔中不加隔层时,

$$Q = Q_c + Q_r + Q_L \tag{12}$$

当空腔中加一水平隔层时,

$$Q = Q_{c1} + Q_{c2} + Q_{r1} + Q_{r2} + Q'_L \tag{13}$$

其中  $Q_r = Q_{r1} + Q_{r2}$ ,  $Q_L = Q'_L$ ,  $Q_c = hA\Delta T$

$$Q_{c1} = hA_1\Delta T, Q_{c2} = hA_2\Delta T$$

由式(4)可得到  $h = Nu_L K/L = CGr_L^{\frac{1}{4}} L^{-(n+1)} K \cdot H^n$ , 又

$A = H \cdot W$ , 故当  $\Delta T, L$  保持恒定时,有

$$Q_c = C' H^{n+1}, \quad C' \text{ 为常数} \tag{14}$$

同理,

$$Q_{c1} = C' H_1^{n+1}; Q_{c2} = C' H_2^{n+1} = C' (H - H_1)^{n+1} \tag{15}$$

令

$$F(H_1) = Q_{c1} + Q_{c2} - Q_c = C' \cdot (H_1^{n+1} + (H - H_1)^{n+1} - H^{n+1}) \tag{16}$$

因

$$\left. \frac{dF(H_1)}{dH_1} \right|_{H_1=H/2} = 0, \quad \left. \frac{d^2F(H_1)}{dH_1^2} \right|_{H_1=H/2} < 0 \tag{17}$$

故  $F(H_1)$  在  $H_1 = H/2$  处达极大值. 对层流、湍流,  $F(H_1)$  的极大值  $F(H_1 = H/2) = 0.149CH^{0.80}$ , 即  $F(H_1 = H/2)/Q_c = 14.9\%$ .

结果表明:当矩形封闭空腔高度  $H$ , 间距  $L$  恒定时,中间加水平隔层对绝热保温不利,而尤以中间加等间距隔层最不利. 例如,加一等间距水平隔层后,热流密度将增加 15% 左右. 这启示我们,在夹层墙和双层玻璃窗中,在强度许可的条件下,应尽量少采用水平隔层.

#### 4.2 双层玻璃窗最佳间距的确定

一般的双层玻璃窗,为讨论方便,假定:(i)窗框任何地方的横截面尺寸相同,即长为  $L$ , 宽为  $\delta$ . (ii)窗户由  $N$  个封闭矩形空间组成. 实际情况中的一些实例可通过调节  $N$  的值得到. 譬如对火车车窗,  $N = 1$ ; 对普通建筑物窗  $N = 1$  或  $N = 3$ .

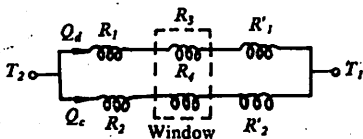


图 6 热网络图

通过窗户散失的热量  $Q = Q_c + Q_r + Q_L + Q_e$ , 其中  $Q_c$  为对流热损,  $Q_r$  为边框导热热损,  $Q_L$  为边缘热损,  $Q_e$  为通过玻璃的辐射热损,  $A$  为窗户透光面积,  $A_k$  为窗框导热横

截面积. 实际上,由于  $H, W \gg L$ , 且在  $Q_L$  方向上的温差较  $Q_c, Q_r$  方向上的温度差小得多,  $Q_L$  可以忽略. 由于玻璃对长波辐射的阻挡作用,  $Q_e$  也可略去. 从而得到图 6 所示的热网络图.

$$Q = \Delta T / (R_1 + R_3 + R'_1) + \Delta T / (R_2 + R_4 + R'_2) \tag{18}$$

其中  $R_1(R'_1), R_2(R'_2)$  可近似地认为与  $L$  无关<sup>[2]</sup>。

令 
$$\dot{q}'' = Q / (AN) \tag{19}$$

对金属窗框(如铝框、钢框、铁框),  $R_3/R_1, R_3/R'_1 \ll 1$ <sup>[2]</sup>, 故,

$$\dot{q}'' = \frac{\Delta T}{NA} \left[ \frac{1}{R_1 + R'_1} + \frac{1}{R_2 + R_4 + R'_2} \right] \tag{20}$$

当  $\dot{q}''$  取最小值时, 有

$$\partial \dot{q}'' / \partial L = 0 \tag{21}$$

将(20)式代入上式, 得到  $\partial R_4 / \partial L = 0$ , 所以, 最佳间距  $L_o = L'_o$ , 见图7。对木质窗框 ( $K = 0.01 \text{ W}/(\text{mK})$ ), 可以证明<sup>[2]</sup>:  $R_1, R'_1 \ll R_3, R_2, R'_2 \ll R_4$ , 式(19)可化简为

$$\dot{q}'' = \frac{\Delta T}{AN} \left( \frac{1}{R_3} + \frac{1}{R_4} \right) \tag{22}$$

将上式代入式(21), 得

$$\frac{R'_3}{R_3^2} + \frac{R'_4}{R_4^2} = 0 \tag{23}$$

将  $R_3 = L / (A_K K), R_4 = 1 / (NhA)$ , 代入上式, 并令  $\eta = A_K / (AN)$ , 得

$$L_o = \left( \frac{K\eta/C_2}{3m - n - 1} \right)^{\frac{1}{3m-n}}, C_2 = K_{air} \cdot C(Bg\Delta T/v^2) \cdot H^* \tag{24}$$

见图8, 不同的  $\Delta T$  下的  $L_o$  值见表4。显然, 极值点的  $Gr_L > Gr_{L_o}$ , 故取  $m = 0.35, n = -0.20, c = 0.07$  的湍流公式代入上式, 并令  $T^* = 300 \text{ K}$ , 则

$$L_o = 2.51 (K\eta H^{0.2})^{0.8} / \Delta T^{0.28} \tag{25}$$

表4 不同  $\Delta T$  下的  $L_o$  值

$\Delta T(\text{K})$	20	30	40	50	60
$L_o(\text{cm})$	6.9	6.2	5.7	5.4	5.1

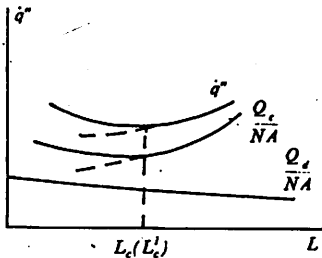


图7 金属窗框的  $\dot{q}'' \sim L$  关系

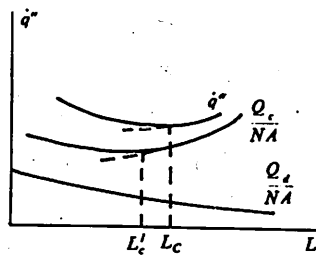


图8 木质窗框的  $\dot{q}'' \sim L$  关系

将窗户的具体几何尺寸及窗框材料的导热系数代入, 即可标出相应的  $L_o$ 。注意, 当  $L_o < L'_c$  时, 取  $L_o = L'_c$ , 见图8。例如, 取  $N = 1, H = 0.5 \text{ m}, K = 0.12 \text{ W}/(\text{mK}), \eta = 0.3$  代入上式, 得

$$L_o = 0.16 / \Delta T^{0.28} \tag{26}$$

参 考 文 献

[1] Bachelor G W, *Quart. Appl. Math.*, 12(1954), No. 1, 209.

- [2] 张寅平,用瞬态实验法和数值计算法对竖板封闭夹层自然对流换热的研究,中国科学技术大学硕士论文,1989.
- [3] Arnold J N, Catton I etc. , *Trans. ASME*, 88(1997), No. 1, 62.
- [4] 陈则韶、葛新石,太阳能学报, 8(1985), No. 2, 15.
- [5] RENQIA SUN(JEN-HSIA) and MING-YU WANG, Proc. Int. Symposium on H. T. , Peking, Hemisphere, 1985 : 145.
- [6] Jacob M, *Heat Transfer*, Johnwiley and Sons. Inc. , Newyork, 1949 : 113.
- [7] Emery A and Chu C N, *Trans. of ASME*, 87(1965), No. 1, 56.
- [8] Catton I, Proc. 6th International Heat Transfer Conference, Toronto, Canada, 1978, p27.
- [9] Nagendra H R etc. , *Nucl. Eng. Des.* , 15(1971), No. 1, 17.
- [10] Dropkin D and Smoersale E, *Tr. ASME, J. Heat Tr.* , 87(1965), 17.
- [11] J. G. A. DeGraf and E. F. M. Von der hele. , *Appl. Sci.* , Section A, 3(1953), 393.
- [12] Eckert etc. , *Int. S. Heat Mass Transfer*, 2(1961), No. 1, 106.
- [13] 罗棣安、韩礼中,太阳能学报, 1(1979), No. 3, 311.
- [14] Михеев М А, Основы теплопередача госэнегизд, 1956 : 152.

## Application of the Transient Method to the Investigation of Natural Convective Heat Transfer in Vertical Rectangular Enclosures

### — The Determination of the Optimal Space Gap of Double-Glazed Windows

Zhang Yinping Chen Zeshao Ge Xinshi

(Department of Engineering Thermophysics)

#### Abstract

This paper presents a new method which has been successfully used for the investigation of natural convection in vertical rectangular enclosures. Based upon this method, two dimensionless correlations for different regions are obtained. The calculated results of our correlations are in good agreement with the average values of the correlations of various investigators. The error of experimental results is smaller than 8.8%. Based upon our relations, the relation which can be used to calculate the optimal space gap of a double-glazed window is obtained. For some special cases, the calculated results are presented.

**Key words:** heat transfer, natural convection, thermal insulation

# 油池火蔓延过程的数值模拟

汪 箭 范维澄

(工程热物理系)

## 摘 要

本文采用 Magnussen 的 EBU 版本的湍流燃烧模型,数值模拟油池从点火到火蔓延这一燃烧过程。计算结果与他人发表的一些实验结果比较,定性合理。

关键词: 数值计算、火灾、油池火,湍流燃烧模型

中图法分类号: TK121

## 1. 引言

油火作为一种常见的火灾现象,危害极大。有必要开展这方面的基础研究。本文试图通过数值计算模拟油池火蔓延过程。

本文考虑的对象是:油池平齐的埋置地下,两边是绝热壁,长度方向为无限大,周围是静止空气,在油池一端实行点火,燃烧过程中假定油面高度维持不变,研究区域取为气相。

## 2. 数学物理模型

作者曾经采用层流和湍流扩散燃烧模型分阶段模拟油池火蔓延过程<sup>[1]</sup>,这次是尝试采用湍流燃烧模型模拟全部燃烧过程。燃烧模型是选用 Magnussen 的 EBU 模型<sup>[2]</sup>,该模型的一个特点是不需区分扩散还是预混燃烧,这样对于油池火没有传遍整个油面时,那种即非纯扩散也非纯预混燃烧的模拟也适用。

基本控制微分方程组可以写成如下通用形式<sup>[3,4]</sup>。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\varphi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\varphi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right) + S_{\varphi}$$

各方程中的变量  $\varphi$ , 交换系数和源项见下表:

通用方程表

方 程	$\varphi$	$\Gamma_\varphi$	$S_\varphi$
连续方程	1	0	0
x-动量方程	u	$\mu$	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right)$
y-动量方程	v	$\mu$	$-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \rho g$
焓方程	h	$\mu/\sigma_h$	0
燃料组分方程	$m_{fs}$	$\mu/\sigma_{fs}$	$-R_{fs}$
氧气组分方程	$m_{ox}$	$\mu/\sigma_{ox}$	$-R_{ox}$
k 方程	k	$\mu/\sigma_k$	$G - \rho \epsilon$
$\epsilon$ 方程	$\epsilon$	$\mu/\sigma_\epsilon$	$(C_1 G - C_2 \rho \epsilon) \frac{\epsilon}{k}$

$$G = \mu \left\{ 2 \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] + \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 - \frac{\beta g}{T \sigma_h} \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right\}$$

Magnussen 的 EBU 燃烧模型式为

$$R_{fs} = A \rho \frac{\epsilon}{k} \min \left[ m_{fs}, \frac{m_{ox}}{s}, \frac{m_{fs}}{B(1+s)} \right]$$

其中 A 和 B 为常数.

通过增加一些辅助方程可以使整个方程组封闭, 初始和边界条件清楚地表明在图 1 中, 这样即可进行数值求解. 由于在 Magnussen 的燃烧模型中没有考虑温度对燃烧速率的影响, 可能会带来片面性. 因此, 在实际计算过程中同时考虑 Arrhenius 的燃烧速率公式, 比较两公式的计算值, 取较小值. 另外还需补充一点, 在初始几个时间步内, 点火阶段只用 Arrhenius 公式, 而没有用 Magnussen 公式, 一经点燃才同时选用两者公式.

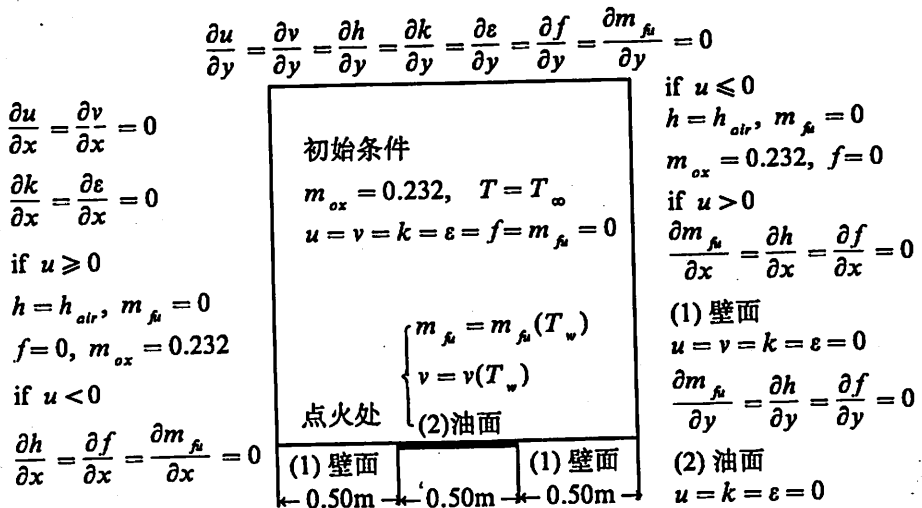


图 1 油池火的初始和边界条件

油面边界是根据相分界面上能量守恒关系处理的.

$$\lambda \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right)_w = \dot{m} [L + C_p(T_w - T_o)]$$

并假定界面上的质量流  $\dot{m}$  满足指数规律

$$\dot{m} = A \exp \left( - \frac{E}{RT} \right)_w$$

其中  $A$  为常数,  $\lambda$  为导热系数,  $C_p$  为比热,  $T_w$  为油面温度,  $T_o$  为上一时刻油面温度. 在求解过程中, 确定油面温度  $T_w$  需经循环迭代过程, 通过不断假定一个温度并检验油面温度是否满足能量守恒关系式而得到.

### 3 计算结果和讨论

图 2 给出油池非定常燃烧过程的火焰结构, 其中(a)、(b)、(c)分别给出点火后 0.1, 0.25

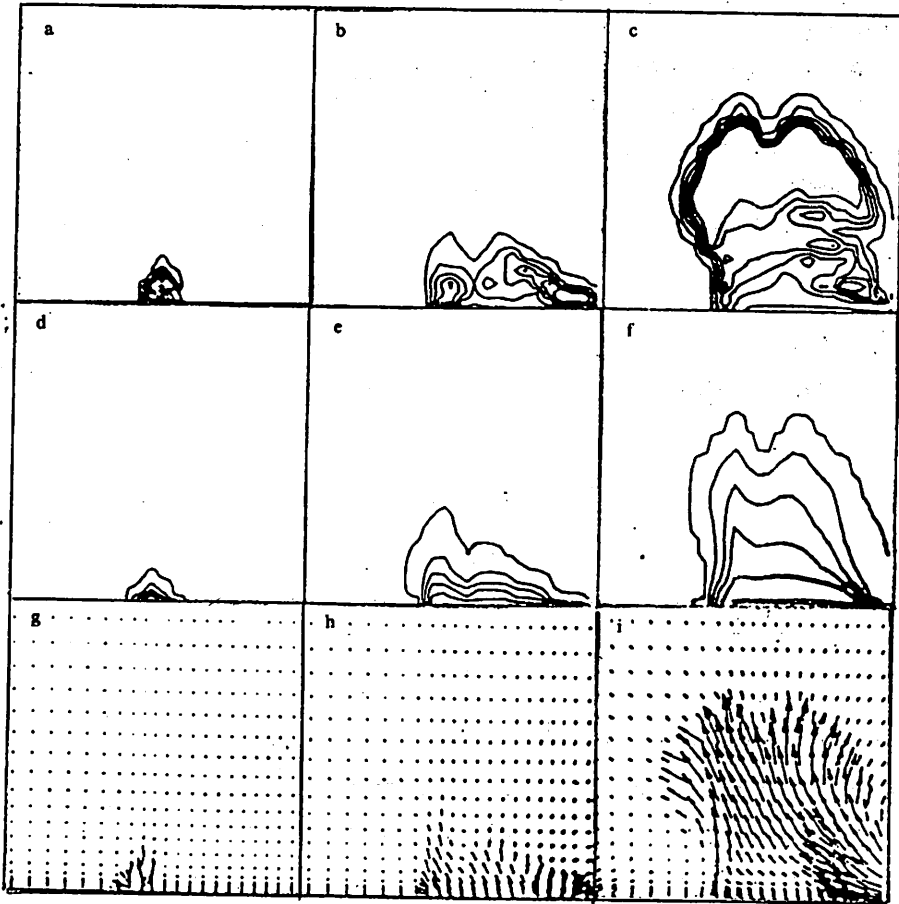


图 2 非定常池火的火焰结构图  
((a)-(c) 温度场 (d)-(f) 燃料浓度场 (g)-(i) 速度场



和 0.5 秒时的温度场, (d)、(e)、(f)和(g)、(h)、(i)给出相应时刻的燃料浓度场和速度场, 从图中可以看出点火后, 火焰从一边传到另一边的情况. 从计算结果中还可看出火焰形状显马鞍型, 这种火焰结构是因为燃烧时, 受浮力影响造成卷吸作用, 周围的空气由两边补充进来, 供氧充分, 宜于燃烧, 加速了化学反应, 燃料也趋向于两边流动, 造成了马鞍型火焰结构.

另外, 本人曾用层流和湍流扩散燃烧模型分阶段处理这一过程, 得到的火焰结构明显不同, 不存在这种马鞍型结构. 两种方法算出的火焰平均传播速度均为  $2m/s$ , 这一点与实验大致符合<sup>[5]</sup>.

试用 Magnussen 的湍流燃烧模型模拟油池点火后非定常燃烧过程是可行的, 计算结果定性合理.

对油池的非定常燃烧过程选用两种方法进行模拟, 哪种结果更符合实际有待实验验证.

### 参 考 文 献

- [1] 汪箭、范维澄, 非定常池火燃烧过程的数值计算和分析, 第三届高校工程热物理学术会议, 工程热物理论文集, 西安交大出版社, 1990
- [2] 范维澄、陈义良、洪茂玲, 计算燃烧学, 安徽科技出版社, 合肥, 1987
- [3] 周力行, 燃烧理论和化学流体力学, 科学出版社, 北京, 1986
- [4] Magnussen B F, and Hjertager B H, On mathematical modeling of turbulent combustion with special on soot formation and combustion, 16th Symposium (Int.) on Combustion, 1976 pp. 719—729
- [5] Michael J. Murphy, Flame spread rates over methanel full spills, *Combustion Science and Technology*, 42(1985): pp. 223—227.

## Prediction of Flame Spreading on an Oil Pool

Wang Jian Fan Weicheng

(Department of Engineering Thermophysics)

### Abstract

A numerical modeling is presented of the unsteady burning process from ignition to flame spread along the surface of an oil pool, based on the turbulent combustion model of Magnussen's version of EBU model. Compared with other experimental data, the results obtained are reasonable.

**Key words:** numerical computation, oil pool, fire, turbulent combustion model

# 水泥结构裂缝检测系统

卢结成 戴英侠 庄镇泉

(电子技术基础部)

## 摘 要

介绍了水泥结构裂缝检测系统的结构与工作原理,讨论了超声接收信号的处理方法、超声检测参数与缺陷判断规则,以及基于规则的智能缺陷判断方法。

关键词: 超声检测, 内部缺陷, 判断规则

中图法分类号: TB551

## 1 引言

超声脉冲检测技术用于水泥构件或结构混凝土的无损探伤,能够有效地测定其内部裂缝、空洞等缺陷。理论分析和大量实验证明,超声波通过内部缺陷构件传播时,接收波的传播速度降低、首波幅度减小、接收信号频率降低且波形发生畸变<sup>[1-2]</sup>。通常使用超声检测仪测量声速、首波幅度、频率和波形,就可对被测构件的质量进行评判。然而这是一种人工测量方式,即超声仪测量的数据需要人工记录、整理、分析和判断。当需要测试和记录大量数据、且对其进行各种处理或作信号分析时,仅用超声仪测量就显得力不从心了。如果把常规的超声检测方法和计算机应用技术结合起来,利用微型机的高速采集、大容量存储和强有力的信号处理功能,再配上相应的自动化、智能化分析软件,不仅能够弥补上述不足,而且能够对内部缺陷进行自动化、智能化和图象化检测。正是基于这一想法,我们研制了一种超声检测系统,它是在PC-286及其兼容机上开发的砼缺陷检测系统,不仅可用于检测水泥结构裂缝,而且能够判断结构混凝土内部的其它缺陷。

## 2 系统的结构与工作原理

利用微型计算机对换能器接收的超声信号进行数据采集、存储及分析处理,得到声速、首

波幅度和接收信号频率等声学参数,然后调用判断规则,进行多参数综合判断,以寻找被测构件内部裂缝的位置和范围,这就是本系统的工作过程。检测系统的工作原理框图如图 1 所示,它由超声源、换能器、放大滤波、整形延时电路和计算机的软、硬件系统组成,A/D 转换卡是换能器与计算机的接口电路。本系统的应用软件采用模块化结构,由系统主模块控制下的多个子模块组成,按功能可分成数据采集、信号处理和缺陷判断三大部分。

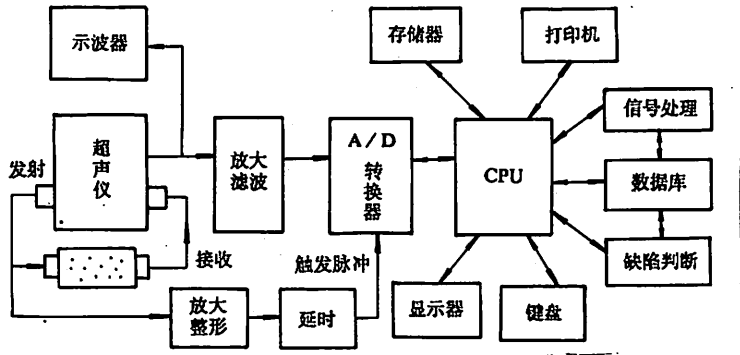


图 1 检测系统工作原理框图

### 2.1 超声接收波及其数据采集

超声换能器的发射探头将电脉冲信号转换为超声波,此声波经被测构件传播之后由接收探头接收下来,再经放大、滤波送至 A/D 转换电路的信号输入端。同时将发射脉冲经放大、整形和延时,送至 A/D 卡的同步触发信号输入端,以便立即采集到包括首波在内的前几个周期的超声接收信号。本系统能够自动、连续地采集几十个测试点的数据,并以不同的文件名将各测点数据存入磁盘文件中。图 2 是对某测点用两种采样频率(10MHz 和 5MHz)采集的超声接收波。

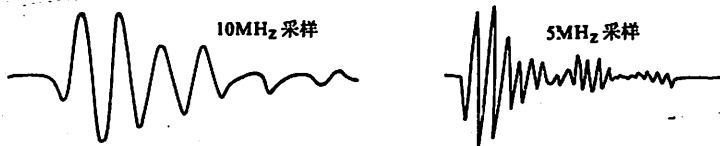


图 2. 超声波采样

### 2.2 超声信号处理

对当前采集的数据或存于磁盘的数据进行各种分析和计算,包括采样数据的预处理,检测超声传播时间(或声速)、首波幅度,计算信号最大值、最小值及平均值,谱分析和检测接收信号主频率等。所有的分析数据和处理结果均能以图形和表格形式在 CRT 上显示或在打印机上输出。

超声传播时间和首波幅度是反映内部缺陷的主要参数,它们的检测精度直接影响缺陷的综合评判。我们应用文献[3]提出的循环比较算法检测声时和首波幅度。其中双向循环比较算法的基本原理是,首先沿着时间轴向右循环比较采样码,检测首波峰点,求得首波幅度;然后从首波峰点向左比较,搜索首波起点,得到声时或声速。如用  $B(I)$  存放接收波幅度的数字编码, $I_s, I_p$  分别代表首波起点和峰点对应的采样周期数,则声时可按(1)式计算,首波幅度由(2)

式计算得到.

$$T = I_s \cdot T_s - T_0 \tag{1}$$

$$V = B(I_s) \cdot r \tag{2}$$

式中  $T_s$  为信号采样周期,  $T_0$  表示整个测试电路的总延时,  $r$  为单位幅度量化电平对应的电压数值.

接收波形的谱分析参数,也是评判内部缺陷的重要依据. 本系统通过频谱分析、功率谱和相关分析,求得各自的振幅谱、相位谱,绘制响应曲线,并设计两种程序分别计算频谱和功率谱(不象有些教科书上用幅度谱的平方代替功率谱),目的是考察二者检测的信号主频率是否相同(应该相同). 另外还在时间域,通过移动光标,从屏幕显示的采样波形上直接测读信号频率.

用上述方法,对某内含裂缝试块测试的声速、首波幅度和接收信号频率如图 3 所示,图中  $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{43}, a_{44}$  表示 16 个不同的测试点. 由图可见,测点  $a_{22}, a_{23}, a_{32}, a_{33}, a_{42}$  及  $a_{43}$  的声速,首波幅度和接收频率均偏低,它们表明了内部缺陷涉及的范围. 这是一个人工制作的水泥块,在它的一个表面开有长 5cm、宽 3mm 并向内部延伸 10cm 的裂缝.

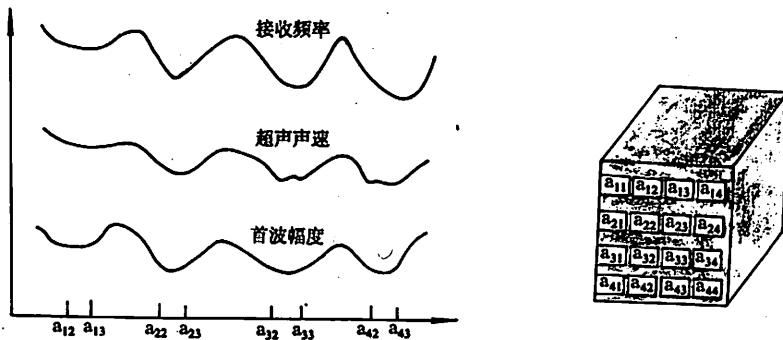


图 3 声速、首波幅度、接收频率与缺陷的位置

### 2.3 缺陷判断方法

从超声接收信号中检测出声速、首波幅度和信号频率等主要参数后,便可根据这些参数对被测构件的质量作出评判.但这仍然需要人工判断,而且判断结果往往受操作者的经验和水平的限制. 如何实现计算机自动“诊断”呢?即从数据采集到给出最后的检测结果(屏幕显示缺陷的位置),全由计算机去完成呢?首先必须解决检测参数的定量问题,这包括两方面内容,一是定量描述各参数对缺陷判断的相对贡献大小,二是对所有参数制订一个相对判断的标准. 对于前者,我们通过反复实验,并结合专家的经验,建立了若干条判断规则;对于后者,引入了阈值的概念,它是这样定义的:首先对一批试块中的密实试块进行测试,计算测试点复盖域各种检测参数的平均值,将每个测试点的检测参数与相应的复盖域平均值相比较,确定每种参数的最大偏离值. 我们把每种参数的平均值与其最大偏离值之和称为该参数的阈值. 式(3)、式(4)和式(5)分别为某参数  $j$  的平均值、最大偏离值和阈值.

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^n x_i \right) \quad \begin{cases} i = 1, 2, 3 \dots \text{测点编号} \\ j = 1, 2, 3, \dots \text{参数序号} \end{cases} \tag{3}$$

$$\sigma_{\max} = \max |x_j - \bar{X}_j| \quad (4)$$

$$\sigma_0 = \bar{X}_j + \sigma_{\max} \quad (5)$$

本系统采用基于规则的缺陷判断方法. 将检测参数与内部缺陷的相关关系、检测者的经验和专家知识,用一条条“如果…则…”的规则形式进行表示,并按功能将规则分为两类,一类为信号处理规则,另一类是缺陷判断规则. 建立信号处理规则,是为了产生中间事实,即为缺陷判断提供必要的事实根据. 下面是其中的三条规则

- 规则 1 如果 采样频率为 10MHz  
则 从第 250 个采样点开始检测首波起点
- 规则 2 如果 采样频率为 5MHz  
则 从第 120 个采样点开始检测首波幅度
- 规则 3 如果 检测声速时,检测点超过首波峰点  
则 返回第 1 个采样点重新检测首波起点

缺陷判断规则用以直接评判内部缺陷的位置,通过将规则的条件部分与相关参数进行匹配,得出被测点是否有缺陷的结论,肯定回答时,在被测试件的立体图形上的相应位置标以“+”号,否则用“-”表示之. 下面是其中的两条规则.

- 规则 4 如果 声时大于阈值且首波幅度小于阈值  
则 被测点内部可能有缺陷
- 规则 5 如果 沿某测试方向的声速和接收波主频率均低于各自的阈值  
则 被测构件内部沿此方向上可能有一条裂缝

### 3 检测结果及讨论

应用本系统对内含裂缝、空洞等水泥试块进行了测试研究,检测结果与普通超声仪测试的结果基本一致. 现以边长 20cm、内含裂缝的立方试块为例,在其两个相对表面测试 16 个对应点,换能器频率为 100KHz,采样频率选择 2.5MHz,超声接收信号经数据采集、信号处理和缺陷判断,检测结果示于图 4. 图 4(a)为各测点声时检测值,图 4(b)为各测点的首波幅度,最后的综合评判结果如图 4(c)所示. 从图中很容易看出裂缝涉及的范围.

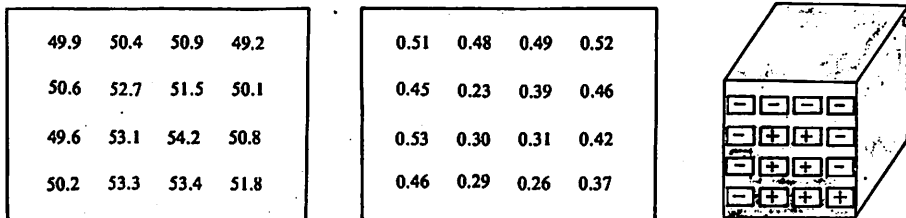


图 4 检测结果

应该指出,水泥构件或结构混凝土是由多种材料构成的具有弹-粘-塑性的复杂凝聚体,声波在其中传播时产生较大的散射与衰减,换能器的选择、耦合条件的好坏以及测试距离都会影

响检测结果。因此使用本系统进行实际检测时应注意以下几个问题:

(1)发射与接收超声波的两只换能器应与被测构件表面保持良好的耦合,各测点的耦合程度尽可能一致。

(2)采集和存储的接收波应包括首波在内的前几个周期。信号处理所截取的数据长度,至少应包括首波在内的前两个周期的接收波数据。

(3)一般情况先对被测件进行粗测,找到缺陷的大概位置,然后在此位置附近进行细测,确定缺陷的准确位置和范围。

#### 4 结论及系统的主要特点

本系统利用声时(声速)、首波幅度和接收频率等多种参数,进行基于规则智能化判断,能够测定水泥结构内部的裂缝、空洞等缺陷。与普通超声仪相比,本系统具有以下特点:

(1)具有准确检测声时(声速)和首波幅度的快速算法,比超声仪移动游标测声时的精度高。

(2)利用声速、首波幅度和接收波形的谱分析参数综合检测水泥结构内部缺陷。

(3)能够快速采集,存储和处理大批测试数据,能以图、文形式输出各种数据及检测结果。

#### 参 考 文 献

- [1] Chung H W and Law K S, Concrete International, Designa Construction, 5(1983),No. 10,42-49.
- [2] 林维正,无损检测,8(1981),29-31
- [3] 卢结成,戴英侠等,应用声学,11(1992),No. 3, 40-43.

## Crack Testing System for Cement Structures

Lu Jiecheng Dai Yingxia Zhuang Zhenquan

(Department of electronic Technology)

#### Abstract

The structure and working principle of the inspection system for cement structure cracks are introduced. ultrasonic testing parameters, judgment rule for flaws, and the method of ultrasonic signal processing and intelligence judgment based on rules for the interior flaws are also discussed.

**Key words:** ultrasonic testing, interior flaw, judgment rule

# 自动限温加热带的起动态与过渡态参数的测量

周佩玲 彭 虎 吴耿锋 张汉昌

(电子技术基础部)

(应用化学系)

## 摘 要

自动限温加热带的质量在很大程度上与材料的性质有关。用 MCS-51 单片机的测量装置可对正温度系数(PTC)材料进行  $I-t$  曲线的测量,并对测量结果进行处理、打印和显示等。本文介绍了该装置的原理和电路特点,并给出了实验结果。

关键词: 自动限温,起动态,过渡态,单片机,可控硅控制器  
中图法分类号: TP399

## 1 前言

自动限温加热带(简称加热带)是用电阻率高的正温度系数材料(简称 PTC)制成的带状加热器<sup>[1]</sup>,用它作为恒温加热器与传统的恒功率电加热器有很大差异。例如,在测量电阻时必须区别被动态和主动态,前者表示测量时加热带发热体(芯带)的焦耳热极小,其温度与环境温度之差可以忽略不计,测得的是材料的性质;后者表示当芯带因吸收电能而升温达到稳定后的状态,测得的是器件的性质。由于加热带的质量在很大程度上与材料性质有关<sup>[2]</sup>,从而被动态性质的测量就成为研究工作的关键之一。

另外,芯带发热区的宽度不一定与芯带的几何尺寸一致,有时甚至很狭,成为线状加热体<sup>[3]</sup>。为了研究这种缺陷,需要记录电流随时间的变化情况,并要用积分求得芯带升温过程中吸收的能量。因此研制一种专用的测量仪器是很有意义的。

## 2 测量原理

被动态参数最好在起动的的一瞬间测量,在电压较高的情况下这是唯一的方法。若用交流

电,时间不可能太短,通常不得少于 0.1s. 用直流电时则无此限制. 每米芯带的 PTC 材料一般约为 15g 重,其热容约为 38J/°Cm. 设最大电压为 600V,起动电流为 3A,若电能引起 PTC 材料的温升不得大于 0.1°C,可以算出测量时间应小于 2ms. 加热带的电容成分不大于 10nF/m,电阻不大于 2kΩ/m,求得时间常数为 2ms,由此确定仪器最长采样时间为 1ms.

加热带通电起动后,随着芯带升温,电阻逐渐增大,与此同时芯带通过护套逐渐向环境传热,当电功率等于热流率后达到稳定态,起动态和稳定态之间为过渡态. 设过渡态中电能全部用于使芯带(含导电母线)升温,测有

$$U \int_0^t I(t)dt = \int_{T_A}^{T_H} (W_1 C_1 W_2 C_2) dt$$

其中,  $U$  为恒定电压,  $I$  为电流,  $t$  为时间,  $W_1, W_2$  和  $C_1, C_2$  分别为 PTC 材料和导电母线的重量及热容,  $T_H$  和  $T_A$  为芯带达到稳态时的温度和环境温度. 由上式可知,测出左边的值就可对加热区的宽度和温度进行研究,因而对测量仪器要求可记录非线性的  $I-t$  曲线和可进行积分运算.

### 3 测量方法及测量电路

为了测量  $I-t$  曲线,实际上转换为测量电压与时间关系曲线更为方便,测量电路如图 1 所示.

用一标准电阻与加热芯带( $R_x$ )串接,交流电经整流调压后输出 220V~600V 的直流恒定电压. 在此电压下,加热芯带电阻  $R_x$  随接通时间而变化的情况可由测出的标准电阻上电压变化来反映. 为了准确测量,设计了一个隔离器,它起着阻抗变换的作用. 50Hz 的滤波器是为了消除整流电压中的 50Hz 交流成分而设置的.

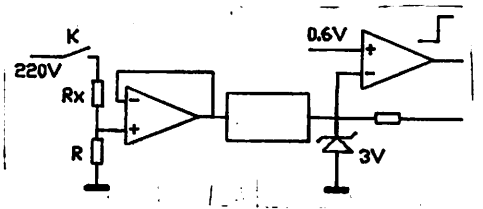


图 1  $I-t$  曲线测量原理图

我们设计的测量系统以单片机 8031 为核心,具有 8 位的 ADC 和 DAC、2K EPROM、8K 静态 RAM 及 4 位 LED 显示器配有电子锁输入方式的键盘和  $\mu p-16$  微型打印机,其电路如图 2.

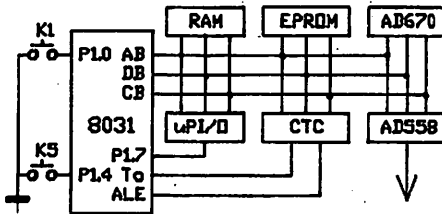


图 2 测量系统电路图

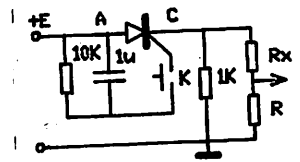


图 3 可控硅消抖动电路

选用速度为 15 $\mu$ s,具有正负模拟信号转换、原码、反码、补码输出,并具有三态缓冲的 AD670、ADC 芯片,但它不允许模入电压大于 3V. 为此设计一个输入保护电路(见图 1),当输入电压超过 3V 时,稳压管导通,使输入电压限制在 3V 左右,从而起到了保护作用.



启动 ADC 采样的手动开关 K(图 1)在闭合时会因抖动而产生误动作,为消除抖动设计了一个可控硅消抖动电路如图 3。

可控硅在此充当一个可控的单向开关。当开关 K 闭合,可控硅控制极 G 将有一个相对于阴极 C 的正向脉冲电压,这个电压将使 A 与 C 之间由阻断突变到导通,导通后控制极不起作用,从而消除抖动。当需要采样数据时,只要按一下启动开关 K,通过消抖动、隔离器,滤波后到比较器输出一正向启动信号,通知单片机开始采样。

在测量系统中,为了降低成本减小体积,设计了一个电子錶式的输入键盘。它不需要传统的键盘扫描或键盘管理器件,大大简化了电路,仅用 5 个普通按键及单片机 8031 的 P1 口,编制相应软件,实现了一键多用。五个键分别为“方式选择”、“换位”、“置数”、“清除”、“回车”。使用时,开始按“方式”键,选择系统进入采数,显示或

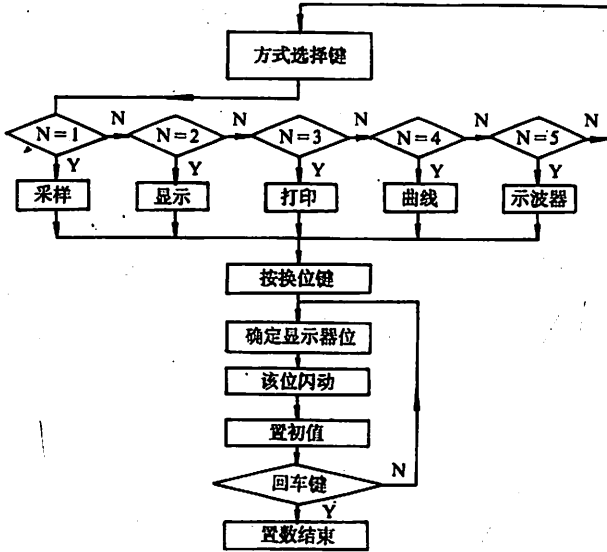


图 4 按键程序流程图

打印等状态之一。通过“换位”键及“置数”键设立系统要求的初始值,并通过人机对话送入若干初值,然后按下回车键,系统立即进入用户所要求的工作状态。若按键有错(不包括回车键),可按“清除”键回到初始态,程序流程见图 4。

打印机接口为并行接口,因单片机 8031 无 I/O 选择信号,故 I/O 寻址均用存储器映象方式,将单片机的 P1 口的第七位接打印机的状态控制线,这样在单片机向打印机送数之前,采用软件查询方式进行数据传送。显示电路是通过单片机的串行口由驱动程序控制<sup>[4,5]</sup>

#### 4 技术性能与测量结果

该测量系统达到的技术指标如下:

- 一路 A/D 转换,转换时间为  $15\mu\text{s}$
- 采样时间可变:  $32\mu\text{s}\sim 0.6\text{s}$
- 最大数据采样点 8192 个
- 可打印单点数据和积分数据,步长可选
- 打印曲线
- 一路 D/A 转换,可接示波器显示曲线
- 可以增址或减址形式在 LED 上显示数据

用该测量系统对自动限温加热带进行了测量,图 5 是数据打印及曲线打印结果。图 5 中:  $\Delta X$  为 X 坐标,表示时间,单位为  $\mu\text{s}$ ,  $\Delta Y$  为 Y 坐标表示电压  $V$  值,单位为  $V/100$ , SUM 为曲线所

形成的面积,三个数据之间的关系如图 6. 不同时刻  $t$  的电压值是选步长为 50 而打印的,即在连续采集的数据中,每隔 50 个挑出一个数据打印,这样既能看出变化趋势,又能节省打印时间和纸张.

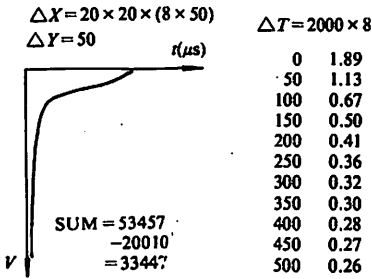


图 5 实验打印结果

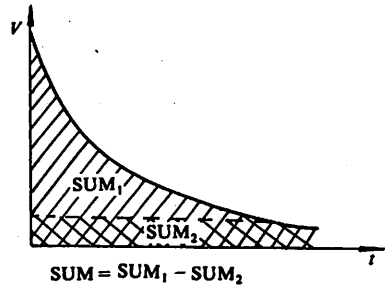


图 6 积分曲线示意图

该测量系统体积小,功耗低,操作方便,配有多种输出设备,可方便地显示观察、打印数据及曲线,是一种理想的测量装置.

参 考 文 献

[1] Bedard R L, USP, 1975, 3 363 914.  
 [2] 苏洪钊等,中国科学技术大学学报, 20(1990), No. 3, 19~22.  
 [3] David A H, et al., USP, 1982, 4 380 708.  
 [4] 林克明、周佩玲,单片微机及其应用,中国科学技术大学出版社,合肥,1989,78~122.  
 [5] 孙涵芳、徐爱卿,MCS-51(96)系列单片机原理及应用,北京航空学院出版社,北京,1988,27~85.

## The Measurement of Parameters of Start State and Transitional State on the Self-Temperature-Limiting Heating Strips

Zhou Peiling Peng Hu Wu Gengfeng

*(Department of Electrical Technology Fundamental)*

Zhang Hanchang

*(Department of Applied Chemistry)*

### Abstract

The qualities of self-temperature-limiting heating strips depend, to a great extent, on the performance of the material. The MCS-51 single-chip-computer-based instrumentation is designed to measure the  $I-t$  curve of the material with positive temperature coefficient (PTC). The data processing, displaying and printing of the results can also be done by the instrumentation. The principle and the characteristics of the circuits are introduced and the experiment results are given in the paper.

**Key words:** self-temperature-limiting, start state, transitional state, single chip computer, silicon controlled rectifier

# 广义 de Bruijn 图中 Euler 回路和 Hamilton 圈的计数

胡龙妹

(信息工程学院)

## 摘 要

讨论了广义 de Bruijn 图  $G_B(n, d)$  的线图的 Euler 回路的个数, 从而给出  $G_B(n, d)$  的 Hamilton 圈的计数定理.

关键词: 广义 de Bruijn 图, Euler 回路, Hamilton 圈

中图法分类号: O157.5

AMS Subject Classification(1991): O5C30

## 1 引言

给定正整数  $n, d$ , 构造下图: 用  $0, 1, \dots, n-1$  代表图中点, 边集合为  $i \rightarrow di+l(\text{mod } n), 0 \leq i \leq n-1, 0 \leq l \leq d-1$ . 称这个图为广义 de Bruijn 图, 记为  $G_B(n, d)$ . [3]证明了当  $\text{gcd}(n, d) = m > 1$  时,  $G_B(n, d)$  是 Hamilton 的. 本文给出并证明了同样条件下  $G_B(n, d)$  的线图的 Euler 回路的计数定理, 由  $G_B(n, d)$  的 Hamilton 圈与其线 Euler 回路的对应关系, 从而得到  $G_B(n, d)$  的 Hamilton 圈的计数. 最后还给出了  $m$  元  $M$  序列计数定理的另一种证明.

## 2 有向图中的若干结论

设  $G$  是有向图,  $V = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  是  $G$  的顶点集合.  $A = (a_{ij})$  是  $G$  的联系矩阵, 其中  $a_{ij}$  是从顶点  $x_i$  到顶点  $x_j$  的边数. 记  $D = (d_{ij})$ , 其中

$$d_{ij} = \begin{cases} \sum_{k=1}^n a_{ki} & \text{如 } i = j \\ 0 & \text{如 } i \neq j \end{cases}$$

于是

$$D - A = \begin{pmatrix} \sum_{i \neq 1} a_{i1} & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & \cdots & & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & \sum_{i \neq n} a_{in} \end{pmatrix}$$

用  $\Delta_1$  表示  $D - A$  中去掉第一行和第一列的主子式, 即

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} \sum_{i \neq 2} a_{i2} & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ & \cdots & & \\ -a_{n2} & -a_{n3} & \cdots & \sum_{i \neq n} a_{in} \end{vmatrix}$$

有向图称作是连通的, 是指对  $G$  中任意两个顶点  $x, y, G$  中均有一条从  $x$  到  $y$  的路.  $G$  称作是拟正则的, 是指  $G$  中每个顶点  $x$ , 它的出次数  $d^+(x)$  等于它的入次数  $d^-(x)$ .

引理 1<sup>[4]</sup> 设  $G$  是没有孤立点的有向图, 则  $G$  有 Euler 回路, 当且仅当  $G$  连通且拟正则.

引理 2<sup>[4]</sup> (Tutte, 1948) 设  $G$  是有向图,  $x_1 \in V$ , 则  $G$  中以  $x_1$  为根的生成树个数为  $\Delta_1$ .

引理 3<sup>[4]</sup> (Ardenne-Ehrenfest, de Bruijn, 1951). 设  $G$  是连通拟正则图,  $V = \{x_1, \dots, x_n\}$ ,

$\Delta_1$  是  $G$  中以  $x_1$  为根的生成树个数, 则  $G$  中 Euler 回路个数为  $\Delta_1 \cdot \prod_{i=1}^n (d^-(x_i) - 1)!$

### 3 计数定理

将  $n$  个顶点分成  $n'$  个组, 每组含  $m$  个点

$$g_i = \{i, i + n', \dots, i + (m - 1)n'\}$$

同组中的点具有相同的后继. 将同组中的  $m$  个点视作一点, 伸向同一点  $j$  的  $m$  条边视作一条边, 此边仍记作  $j$ . 这样得到新的图  $G' = G_B(n', d)$  具有  $n'$  个点,  $n'm = n$  条边. 于是  $G_B(n', d) = G'$  是  $G_B(n, d)$  的线图.

[3] 中证明了当  $\gcd(n, d) = m > 1$  时,  $G_B(n, d)$  有线图  $G' = G_B(n', d)$ , 其中  $n'm = n$ . 并且  $G'$  是 Euler 的, 从而  $G_B(n, d)$  是 Hamilton 的.

我们知道  $G_B(n, d)$  的 Hamilton 圈对应于其线图的 Euler 回路. 因此要确定  $G_B(n, d)$  的 Hamilton 圈的计数, 只要确定其线图的 Euler 回路计数即可. 由于  $G_B(n, d)$  与它的线图  $G_B(n', d)$  只是在顶点个数上的差别, 所以在下面的讨论中不妨将  $G_B(n, d)$  就看作线图.

设  $d = qn + r, 0 \leq r \leq n - 1$ . 不难求得  $G_B(n, d)$  的联系矩阵为

$$\begin{pmatrix} \overbrace{q+1 \cdots q+1}^r & q & q \cdots q & \\ & q & q+1 & \cdots \\ & \cdots & & \\ q \cdots q & q+1 & q+1 \cdots & q+1 \end{pmatrix}_{n \times n} \quad (1)$$

它的特点是:第  $i+1$  行可以由第  $i$  行循环右移  $r$  位得到 ( $i=1, 2, \dots, n-1$ ). 这是一个特殊的  $n$  阶  $r$ -循环矩阵. 我们将详细讨论线图  $G_B(n, d)$  的全部 Euler 回路个数, 从而确定了相应点图的全部 Hamilton 圈的个数.

### 3.1 素循环计数定理

**定义 1** 设  $A=(a_{ij})$  是  $n$  阶复数方阵. 如果  $A$  的每一行(除第一行外)可以从它的前一行循环右移  $r$  位得到, 则称  $A$  为  $r$ -循环矩阵. 设  $gd(r, n)=m$ . 若  $m=1$ , 称  $A$  为  $r$ -素循环矩阵; 若  $1 < m < n$ , 称  $A$  为非素循环矩阵; 若  $r=0$ , 则称  $A$  为  $0$ -循环矩阵.

**定义 2** 设  $gcd(r, n)=1$ . 在模  $n$  完全剩余系  $R=\{1, 2, \dots, n\}$  中定义关系“ $\sim$ ”: 称  $R$  中元  $h_1, h_2$  有关系  $\sim$ , 是指存在正整数  $q$ , 使得  $h_1=h_2r^q \pmod n$ . 记作  $h_1 \sim h_2$ .

不难看出“ $\sim$ ”是等价关系, 从而“ $\sim$ ”将完全剩余系分成若干等价类. 用  $c(h, r, n)$  表示  $h$  所在的等价类, 于是有

$$c(h, r, n) = \{h, hr, hr^2, \dots, hr^{f-1}, (\text{mod } n)\}$$

其中  $f$  是使同余式  $hr^f=h \pmod n$  成立的最小正整数.

**引理 4<sup>[5]</sup>** 设  $A=(a_{ij})$  是  $n$  阶  $r$ -素循环矩阵, 令  $\{c(h_i, r, n), i=1, \dots, t\}$  是等价关系“ $\sim$ ”下等价类的全体所成的集合, 其中  $h_i$  所在的类含  $f_i$  个元素. 则存在可逆矩阵  $N$ , 使得

$$N^{-1}AN = \text{diag}[W(h_1, A), W(h_2, A) \cdots, W(h_t, A)]$$

其中

$$W(h_i, A) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & w(r^{f_i-1}h_i, A) \\ w(h_i, A) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & w(rh_i, A) & \cdots & 0 & 0 \\ & \cdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & W(r^{f_i-2}h_i, A) & 0 \end{pmatrix}_{f_i \times f_i}$$

且  $w(h, A) = a_{11} + a_{12}e^h + \cdots + a_{1n}e^{(n-1)h}$ ,  $e$  是  $n$  次本原单位根.

**引理 5** 令  $a_f a_{f-1} \cdots a_1 \neq 0$ , 则  $f \times f$  阶矩阵

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & a_f \\ a_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{f-1} & 0 \end{pmatrix}$$

的特征根是  $a_f a_{f-1} \cdots a_1$  的  $f$  次根.

**证明** 由特征多项式  $|\lambda E - A| = \lambda^f - a_1 a_2 \cdots a_f$  即得.

**引理 6** 设  $n$  阶矩阵  $H$  的行和列和均为零且  $H$  的  $n$  个特征根为  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ . 则  $H$  的任意  $n-1$  阶主子式均相同. 将  $n-1$  阶主子式记作  $\Delta_1$ , 则

$$\Delta_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \alpha_1 \cdots \alpha_{i-1} \alpha_{i+1} \cdots \alpha_n$$

其中  $a_1 \cdots a_{i-1} \hat{a}_i a_{i+1} \cdots a_n$  表示在  $n$  个元  $a_1, \dots, a_{i-1}, a_i, a_{i+1}, \dots, a_n$  中去掉  $a_i$  后剩余  $n-1$  个元的乘积.

证明 设  $H=(h_{ij}), \Delta_{ii}$  是在  $H$  中划去第  $i$  行和第  $i$  列得到的主子式. 将  $\Delta_{ii}$  的  $n-1$  个行全部加到第一行,  $n-1$  个列全部加到第一列, 则有

$$\Delta_{ii} = (-1)^2(-1)^{i-2}(-1)^{i-2}\Delta_{11} = \Delta_{11} = \Delta_1, (i = 2, 3, \dots, n)$$

由于

$$|\lambda E - H| = \lambda^n + \dots + (-1)^{n-1}n\Delta_1\lambda + (-1)^n|H|$$

故得

$$n\Delta_1 = \sum_i a_1 \cdots a_{i-1} \hat{a}_i a_{i+1} \cdots a_n$$

定理 1 设广义 de Bruijn 图  $G_B(n, d)$  中  $\gcd(n, d) = 1$ , 又设“ $\sim$ ”将  $R = \{1, 2, \dots, n\}$  划分成  $t$  个等价类  $c(h_i, r, n), h_i$  所在的类含  $f_i$  个元 ( $i = 1, 2, \dots, t$ ). 则此图的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!]^n \prod_{i=1}^{t-1} (d^{f_i} - 1)$$

其中约定  $h_t = n$ .

证明 由于  $d = qn + r, 0 \leq r \leq n-1$ , 故由  $\gcd(n, d) = 1$  可知  $\gcd(r, n) = 1$ .  $G_B(n, d)$  的联系矩阵(1)是  $r$ -素循环矩阵. 由引理 4 知  $A$  相似于对角块矩阵

$$\text{diag}[W(h_1, A), W(h_2, A), \dots, W(h_t, A)].$$

其中  $h_i$  为  $R$  在等价关系“ $\sim$ ”下的代表元,  $|c(h_i, r, n)| = f_i, i = 1, 2, \dots, t$ . 下面先求  $W(h_i, A)$  的特征根. 注意到  $n$  所在的类仅含  $n$  自身, 故  $W(h_t, A) = (qn+r)$  是一阶矩阵. 当  $i = 1, 2, \dots, t-1$  时, 均有  $n \nmid h_i$ , 于是有

$$W(r'h_i, A) = q \left( \sum_{k=0}^{f_i-1} e^{r'k h_i} \right) + \sum_{k=0}^{r-1} e^{r'k h_i} = \frac{1 - (e^{r' h_i})^{f_i}}{1 - e^{r' h_i}}$$

将这  $f_i$  个数相乘

$$\frac{1 - (e^{r' h_i})^{f_i}}{1 - e^{r' h_i}} \cdot \frac{(1 - e^{r' h_i})^{f_i}}{1 - e^{r' h_i}} \cdots \frac{1 - (e^{r' i^{-1} h_i})^{f_i}}{1 - e^{r' i^{-1} h_i}} = 1 \neq 0$$

由引理 5 知  $W(h_i, A)$  的特征根为

$$1, \xi_i, \xi_i^2, \dots, \xi_i^{f_i-1}$$

其中  $\xi_i$  为  $f_i$  次本原单位根,  $1 \leq i \leq t-1$ . 从而得到  $A$  的特征根为

$$qn + r, 1, \xi_i, \xi_i^2, \dots, \xi_i^{f_i-1}, i = 1, 2, \dots, t-1$$

由于  $D = \text{diag}[qn+r, \dots, qn+r]$ , 于是  $D-A$  的  $n$  个特征根为

$$0, qn + r - \xi_i^j, i = 1, \dots, t-1, j = 0, 1, \dots, f_i-1$$

由于  $D-A$  的行和与列和均为零, 由引理 6 知

$$\Delta_1 = \frac{1}{n} \prod_{i=1}^{t-1} \prod_{j=0}^{f_i-1} (qn + r - \xi_i^j)$$

再由引理 3 知  $G_B(n, d)$  的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!]^n \prod_{i=1}^{t-1} \prod_{j=0}^{f_i-1} (qn + r - \xi_i^j) = \frac{1}{n} [(d-1)!]^n \prod_{i=1}^{t-1} (d^{f_i} - 1)$$

3.2 0-循环计数定理

当  $r=0$  时, 矩阵  $A$  称作 0-循环的. 此时  $A$  的每行元素均相同.

引理 7 设

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

是 0-循环矩阵且  $\sum a_i \neq 0$ , 则存在可逆矩阵  $N$  使

$$N^{-1}AN = \text{diag}[\sum a_i, 0, \dots, 0]$$

此引理不难证明, 此处略去.

定理 2 设广义 de Bruijn 图  $G_B(n, d)$  中  $d=qn$ , 则此图的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!] \cdot d^{n-1}.$$

证明 由于  $d=qn$ , 从而  $r=0$ . 此时  $G_B(n, d)$  的联系矩阵  $A=q\bar{E}_n$ , 其中  $\bar{E}_n$  表示  $n$  阶全 1 矩阵.  $A$  的一行元素之和  $\sum a_i = nq \neq 0$ , 由引理 7 知  $A$  相似于对角形  $\text{diag}[nq, 0, \dots, 0]$ . 由于  $D = \text{diag}[qn, \dots, qn]$ , 故得  $D-A$  的特征根为  $0, qn, \dots, qn$ . 由于  $D-A$  的行和与列和均为零, 由引理 6 知  $\Delta_1 = \frac{1}{n} (qn)^{n-1}$ . 再利用引理 3 可得本定理.

3.3 非素循环计数定理

当  $\text{gcd}(n, d)=m$  且  $1 < m < n$  时,  $G_B(n, d)$  的联系矩阵  $A$  的特征根不能直接用上二节中所述方法求. 为了求出这类矩阵的特征根, 对  $A$  作分块处理.

设  $A$  是  $n$  阶  $r$ -非素循环矩阵且  $\text{gcd}(n, r)=m, n=mn_1$ . 将  $n$  阶矩阵  $A$  分块成  $m$  阶复合矩阵  $A=(A_{ij})$ , 其中  $A_{ij}$  是  $n_1 \times n_1$  阶子矩阵. 由  $A$  的定义可知  $A$  是 0-循环矩阵, 即  $A_{ij}=A_{i+1, j}, i=2, \dots, m; j=1, 2, \dots, m$ .

引理 8<sup>[5]</sup> 设  $nm$  阶矩阵  $A$  的分块  $A=(A_{ij})$  为  $m$  阶复合 0 循环矩阵, 其中  $A_{ij}$  为  $n_1$  阶子矩阵. 若  $\sum_j A_{ij}$  相似于  $\text{diag}[J_1, J_0]$ , 其中  $J_1$  是非退化的若当矩阵,  $J_0$  是幂零若当矩阵, 则  $A$  相似于  $\text{diag}[J_1, W_0, 0]$ , 其中  $W_0$  是幂零若当矩阵.

下面将  $\sum_j A_{ij}$  简记为  $\sum A_{ij}$ .

引理 9 设  $A$  是形如 (1) 的  $n$  阶  $r$ -循环矩阵且  $\text{gcd}(n, r)=m(1 < m < n), n=n_1m$ . 令  $r = q_1n_1 + r_1, 0 \leq r_1 < n_1$ , 则  $\sum A_{ij}$  是  $r_1$ -循环矩阵且

$$\sum A_{ij} = \begin{pmatrix} \overbrace{mq + q_1 + 1, \dots, mq_1 + 1, mq + q_1, \dots, mq + q_1}^{r_1 \uparrow} \\ \cdots \quad mq + q_1 \quad \quad \quad mq + q_1 + 1 \\ \cdots \end{pmatrix}_{n_1 \times n_1}$$

证明 由于  $A$  的元素或为  $q+1$ , 或为  $q$ , 并且  $A$  的任意一行中的  $r$  个  $q+1$  连续相随, 而对  $A$  作分块成复合矩阵  $A$  时, 这  $r$  个元恰分在  $A$  的  $q_1 + \lceil \frac{r_1}{n_1} \rceil$  个连续的子矩阵中. 其中  $\lceil x \rceil$  表



示不小于  $x$  的最小正整数. 因此  $n_1$  阶矩阵  $\sum A_{1j}$  中元或为  $mq + q_1 + 1$ , 或为  $mq + q_1$ . (下证  $\sum A_{1j}$  是  $r_1$ -循环的). 令  $\sum A_{1j} = (bst)$ , 于是

$$1) \text{ 当 } r_1 \neq 0 \text{ 时, } b_{11} = \sum_{k=0}^{n_1-1} a_{1, k_1+r_1+1} = \sum_{k=0}^{q_1} a_{1, k_1+r_1+1} + \sum_{k=q_1+1}^{n_1-1} a_{1, k_1+r_1+1} = (q_1 + 1)(q_1 + 1) + (m - q_1 - 1)q_1 = mq + q_1 + 1.$$

同理可得  $b_{12} = \dots = b_{1r_1} = mq + q_1 + 1$ . 又

$$b_{1, r_1+1} = \sum_{k=0}^{n_1-1} a_{1, k_1+r_1+1} = mq + q_1$$

同理可得  $b_{1, r_1+2} = \dots = b_{1, n_1} = mq + q_1$ . 而  $\sum A_{1j}$  的第二行元素

$$\begin{aligned} b_{2, r_1} &= \sum_{k=0}^{m-1} a_{2, k_1+r_1} = \sum_{k=0}^{m-1} a_{1, k_1+r_1-r} = \sum_{k=0}^{m-1} a_{1, (k-q_1-1)n_1+s_1} \\ &= \sum_{k=0}^{m-1} a_{1, k_1+s_1} = b_{1, s_1} = mq + q_1 \\ b_{2, r_1+1} &= \sum_{k=0}^{m-1} a_{2, k_1+r_1+1} = \sum_{k=0}^{m-1} a_{1, k_1-r+r_1+1} = \sum_{k=0}^{m-1} a_{1, (k-q_1)+s_1+1} \\ &= \sum_{k=0}^{m-1} a_{1, k_1+1} = b_{11} = mq + q_1 + 1 \end{aligned}$$

由于  $\sum A_{1j}$  中  $r_1$  个  $mq + q_1 + 1$  连续相随, 从而  $\sum A_{1j}$  是  $r_1$ -循环的.

2) 当  $r_1 = 0$  时, 对  $A$  作分块成复合矩阵  $A$  时, 这  $r$  个元恰分在  $A$  的  $q_1$  个连续的子矩阵中. 类似 1) 的讨论可知  $\sum A_{1j}$  是 0-循环的.

下面分  $r_1 \neq 0$  和  $r_1 = 0$  两种情况给出相应的计数定理.

### 3.3.1 复合情形下素循环计数定理

设广义 de Bruijn 图  $G_B(n, d)$  中  $gcd(n, d) = m > 1$ , 为求此图的 Euler 回路个数, 先给出一个算法  $f(n, r)$ . 对参数  $n, r$  按如下步骤作:

0) 记  $n = n_1 m$ , 用  $n_1$  对  $r$  作带余除法, 得  $r = q_1 n_1 + r_1, 0 \leq r_1 < n_1$ .

1) 若  $r_1 = 0$  或  $gcd(n_1, r_1) = m_1 = 1$ , 则停并记  $f(n, r) = \langle n_1, r_1 \rangle$ . 否则, 记  $n_1 = n_2 m_1$ , 用  $n_2$  对  $r_1$  作带余除法, 得  $r_1 = q_2 n_2 + r_2, 0 \leq r_2 < n_2$

...

k) 若  $r_k = 0$  或  $gcd(n_k, r_k) = m_k = 1$ , 则停并记  $f(n, r) = \langle n_k, r_k \rangle$ . 否则, 记  $n_k = n_{k+1} m_k$ , 用  $n_{k+1}$  对  $r_k$  作带余除法, 得

$$r_k = q_{k+1} n_{k+1} + r_{k+1}, \quad 0 \leq r_{k+1} < n_{k+1} \dots$$

由此算法知  $n > n_1 > n_2 \dots > n_k > n_{k+1} \dots$ , 由于  $n_i > r_i$ , 故有限步后必出现  $r_k = 0$  或  $m_k = 1$ . 从而算法  $f(n, r)$  必在有限步停止, 即存在正整数  $k$ , 使用  $f(n, r) = \langle n_k, r_k \rangle$ .

定理 3 设广义 de Bruijn 图  $G_B(n, d)$  中  $gcd(n, d) = m > 1$ , 满足  $f(n, r) = \langle n_k, r_k \rangle$  且  $gcd(n_k, r_k) = 1$ , 则此图的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!]^{i_1} d^{i_2} \prod_{i=1}^{i_1-1} (d^{i_i} - 1).$$

其中  $i_k$  是等价关系 " $\sim$ " 将  $R = \{1, 2, \dots, n_k\}$  分成等价类  $C(h_i, r_k, n_k)$  的类数,  $f_i$  是  $h_i$  所在类的元

素个数,  $i=1, 2, \dots, t_k-1$ , 约定  $h_i=n_i, d=qn+r$ .

证明 由定理条件知存在  $k$  个大于 1 的最大公约数  $m_0=m, m_1, \dots, m_{k-1}$ , 但  $m_k=1$ . 依次对矩阵  $A$  作  $k$  次分块如下

第 1 步 将  $A$  分成  $m_0$  阶复合矩阵  $A_{n_0}^{(1)} = (A_{ij}^{(1)})$ , 其中  $A_{ij}^{(1)}$  是  $n_1$  阶子阵, 再作  $\sum A_{ij}^{(1)}$ , 记作  $\sum_{n_1}^{(1)}$ .

第 2 步 将矩阵  $\sum A_{ij}^{(1)} = \sum_{n_1}^{(1)}$  分成  $m_1$  阶复合矩阵  $A_{n_1}^{(2)} = (A_{ij}^{(2)})$ , 其中  $A_{ij}^{(2)}$  是  $n_2$  阶子阵, 再作  $\sum A_{ij}^{(2)} = \sum_{n_2}^{(2)}$ . ... ..

第  $k$  步 将矩阵  $\sum_{n_{k-1}}^{(k-1)}$  分成  $m_{k-1}$  阶复合矩阵  $A_{n_{k-1}}^{(k)} = (A_{ij}^{(k)})$ , 其中  $A_{ij}^{(k)}$  是  $n_k$  阶子阵. 再作  $\sum A_{ij}^{(k)} = \sum_{n_k}^{(k)}$ .

在上述分块过程中, 得到的  $A_{n_0}^{(1)}, A_{n_1}^{(2)}, \dots, A_{n_{k-1}}^{(k)}$  均为复合 0-循环矩阵, 而矩阵  $\sum_{n_1}^{(1)}, \sum_{n_2}^{(2)}, \dots, \sum_{n_{k-1}}^{(k-1)}, \sum_{n_k}^{(k)}$  分别是形如引理 9 中给出的  $r_1, r_2, \dots, r_k$ -循环矩阵. 下面计算  $\sum_{n_k}^{(k)}$  的特征根.

由假设  $m_k = \text{gcd}(n_k, r_k) = 1$ , 由引理 9 知  $\sum_{n_k}^{(k)}$  是  $r_k$ -素循环的, 并且

$$\sum_{n_k}^{(k)} = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^k q_j \prod_{i=j}^{k-1} m_i + 1, \dots, \sum_{j=0}^k q_j \prod_{i=j}^{k-1} m_i + 1, \sum_{j=0}^k q_j \prod_{i=j}^{k-1} m_i, \dots, \sum_{j=0}^k q_j \prod_{i=j}^{k-1} m_i \\ \dots & \sum_{j=0}^k q_j \prod_{i=j}^{k-1} m_i, \sum_{j=0}^k q_j \prod_{i=j}^{k-1} m_i + 1, \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

其中约定  $m_0=m, q_0=q, \prod_{i=k}^{k-1} m_i=1$ .

设等价关系“ $\sim$ ”将模  $n_k$  完全剩余系  $\{1, 2, \dots, n_k\}$  分成  $t_k$  个等价类  $c(h_i, r_k, n_k), i=1, 2, \dots, t_k$ . 其中  $h_i$  为等价类的代表元. 设  $|c(h_i, r_k, n_k)| = f_i$ , 类似定理 1 的证明知  $\sum_{n_k}^{(k)}$  的特征根为

$$qn + r, \xi_i^j, i = 1, 2, \dots, t_k - 1; j = 0, 1, \dots, f_i - 1.$$

其中  $\xi_i$  是  $f_i$  次本原单位根.

由引理 8 知  $\sum_{n_{k-1}}^{(k-1)}$  的全部特征根为

$$qn + r, \xi_i^j (i = 1, 2, \dots, t_k - 1; j = 0, 1, \dots, f_i - 1), \underbrace{0, \dots, 0}_{n_{k-1} - n_k \uparrow}.$$

即  $\sum_{n_{k-1}}^{(k-1)}$  的特征根只是在  $\sum_{n_k}^{(k)}$  的特征根的基础上再增加  $n_{k-1} - n_k$  个零. 对  $\sum_{n_{k-1}}^{(k-1)}$  再应用引理 8, 得到  $\sum_{n_{k-2}}^{(k-2)}$  的全部特征根为

$$qn + r, \xi_i^j (i = 1, \dots, t_k - 1; j = 0, 1, \dots, f_i - 1), \underbrace{0, \dots, 0}_{n_{k-2} - n_k \uparrow}.$$

如此下去, 反复利用引理 8 最后得到  $A$  的特征根为

$$qn + r, \xi_i^j (i = 1, 2, \dots, t_k - 1; j = 0, 1, \dots, f_i - 1), \underbrace{0, \dots, 0}_{n - n_k \uparrow}.$$

由于  $D=(qn+r)E$ , 所以  $D-A$  的  $n$  个特征根为

$$0, \underbrace{qn + r, \xi^i}_{s-1 \uparrow} (i = 1, 2, \dots, t_i - 1; j = 0, 1, \dots, f_i - 1), \underbrace{qn + r, \dots, qn + r}_{s-1 \uparrow}$$

又由于  $D-A$  的行和与列和均为零, 由引理 6 知

$$\Delta_1 = \frac{1}{n} (qn + r)^{s-1} \prod_{i=1}^{t_1-1} \prod_{j=0}^{f_i-1} (qn + r - \xi^i)$$

再由引理 3 可得本定理.

### 3.3.2 复合情形下 0-循环计数定理

**定理 4** 设广义 de Bruijn 图  $G_B(n, d)$  中  $\gcd(n, d) = m > 1$ , 满足  $f(n, r) = \langle n_k, r_k \rangle$  且  $r_k = 0$ . 则此图的 Euler 回路个数为  $\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{s-1}$ .

**证明** 由于  $f(n, r) = \langle n_k, r_k \rangle$ . 对  $A$  作一系列分块, 得  $\sum_{n_1}^{(1)}, \sum_{n_2}^{(2)}, \dots, \sum_{n_s}^{(s)}$ . 由于  $r_k = 0$ , 由引理 9 知  $\sum_{n_i}^{(i)} = (\sum_{j=0}^k q_j \prod_{i=j}^{k-1} m_i) \bar{E}_{n_i}$  是 0-循环的. 因为  $\sum_{n_i}^{(i)}$  的一行和为  $n_i (\sum_{j=0}^k q_j \prod_{i=j}^{k-1} m_i) = nq + r \neq 0$ , 由引理 7 知  $\sum_{n_i}^{(i)}$  相似于  $\text{diag}[nq + r, \underbrace{0, \dots, 0}_{s-1 \uparrow}]$ . 从而  $\sum_{n_i}^{(i)}$  的特征根为  $qn + r, \underbrace{0, \dots, 0}_{s-1 \uparrow}$ . 再由引理 8 知  $\sum_{n_{i-1}}^{(i-1)}$  的特征根为  $qn + r, \underbrace{0, \dots, 0}_{s-1 \uparrow}$ . 对  $\sum_{n_{s-2}}^{(s-2)}, \dots, \sum_{n_1}^{(1)}$  反复利用引理 8, 最后得到  $A$  的特征根为  $qn + r, \underbrace{0, \dots, 0}_{s-1 \uparrow}$ . 因为  $D = (qn + r)E$ , 故  $D - A$  的特征根为  $0, \underbrace{qn + r, \dots, qn + r}_{s-1 \uparrow}$ . 注意到  $D - A$  的行和与列和均为零, 由引理 6 知

$$\Delta_1 = \frac{1}{n} (qn + r)^{s-1} = \frac{1}{n} d^{s-1}$$

再由引理 3 知  $G_B(n, d)$  的 Euler 回路个数为  $\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{s-1}$ .

### 3.4 计数定理的统一形式

**定理 1** 和 **定理 2** 可以看作对  $A$  作零次分块得到. 修改 3.3.1 中算法  $f(n, r)$  的第零步就可以将这四个定理归并成二个定理, 分称它们为素循环定理和零循环定理.  $f(n, r)$  中 0 步修改为:

0) 令  $n_0 = n, r_0 = r$ . 若  $r_0 = 0$  或  $(n_0, r_0) = m_0 = 1$ , 则停并记  $f(n, r) = \langle n_0, r_0 \rangle$ . 否则, 记  $n_0 = n_1 m_0$ , 用  $n_1$  对  $r_0$  作带余除法;  $r_0 = q_1 n_1 + r_1, 0 \leq r_1 < n_1$ . 算法  $f(n, r)$  其它步不变.

**素循环定理** 设  $G_B(n, d)$  满足  $f(n, r) = \langle n_k, r_k \rangle$  且  $\gcd(n_k, r_k) = 1$ , 则此图的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{s-1} \prod_{i=1}^{t_i-1} (d^{f_i} - 1)$$

其中  $t_i$  是等价关系“ $\sim$ ”将  $R = \{1, 2, \dots, n_k\}$  分成等价类  $c(h_i, r_i, t_{i-1})$  的类数,  $f_i$  是  $h_i$  所在类的元素个数,  $i = 1, 2, \dots, t_i - 1$ . 约定  $h_i = n_k, d = qn + r$ .

**零循环定理** 设  $G_B(n, d)$  满足  $f(n, r) = \langle n_k, r_k \rangle$  且  $r_k = 0$ , 则此图的 Euler 回路个数为  $\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{s-1}$ .

**推论 1** 设  $G_B(n, d)$  满足  $f(n, r) = \langle n_k, r_k \rangle, \gcd(n_k, r_k) = 1$  且  $n_k = p_1 p_2 \dots p_t$  ( $p_i$  为互不相同的

素数),  $r_k$  模  $p_i$  的阶记为  $e_i$ , 则  $G_B(n, d)$  的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{n-r_1-\dots-r_s} \prod_{\substack{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_s \leq s \\ 1 \leq i \leq s}} (d^{[e_{i_1}, \dots, e_{i_s}]} - 1) \prod_{j=1}^s (r_j - 1)^{[e_{i_1}, \dots, e_{i_s}]}$$

其中  $[e_1, \dots, e_i]$  为  $e_1, \dots, e_i$  的最小公倍数.

推论 2 1) 若  $n_k = p$  ( $p$  是奇素数) 且  $\gcd(n_k, r_k) = 1$ , 则  $G_B(n, d)$  的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{n-r} (d^e - 1)^{\frac{r-1}{e}}$$

其中  $e$  是  $r_k$  模  $p$  的阶. 特别  $r_k$  是模  $p$  的原根时,  $G_B(n, d)$  的 Euler 回路个数为  $\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{n-r} (d^{p-1} - 1)$ .

1) 若  $n_k = 2p$  ( $p$  是奇素数) 且  $\gcd(n_k, r_k) = 1$ , 则  $G_B(n, d)$  的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{n-2r} (d^e - 1)^{\frac{2r-2}{e}} (d-1)$$

其中  $e$  是  $r_k$  模  $p$  的阶. 特别  $r_k$  是模  $2p$  的原根时,  $G_B(n, d)$  的 Euler 回路个数为  $\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{n-2r} (d-1) (d^{p-1} - 1)^2$ .

推论 3 设  $G_B(n, d)$  满足  $n_k = p^i$  ( $p$  是素数) 且  $\gcd(n_k, r_k) = 1$ , 则  $G_B(n, d)$  的 Euler 回路个数为

$$\frac{1}{n} [(d-1)!]^s d^{n-r} \prod_{i=1}^s (d^{e_i} - 1)^{\frac{r_i - 1}{e_i}}$$

其中  $e_i$  为  $r_k$  模  $p^i$  的阶 ( $i=1, \dots, s$ ).

#### 4. $m$ 元 $M$ 序列的计数定理的又一证明

定义 3 周期为  $m^s$  的  $m$  元序列

$$(a_0, a_1, \dots, a_{m^s-1}, \quad a_i \in \{0, 1, \dots, m-1\})$$

称为  $n$  级  $m$  序列, 是指该序列  $m^s$  个状态

$$(a_i, a_{i+1}, \dots, a_{i+m-1}), \quad (0 \leq i \leq m^s - 1)$$

彼此不同(从而恰好是全部可能的状态.)

定义 4  $n$  级  $m$  元 de Bruijn-Good 图是一个有向图  $G_n(m)$ . 顶点集合  $V = \{(a_0, a_1, \dots, a_{n-1}) \mid a_i \in \{0, 1, \dots, m-1\}\}$ , 边集合为  $\{(a_0, \dots, a_{n-1}) \rightarrow (a_1, \dots, a_{n-1}, a_n)\}$ . 用  $(a_0, a_1, \dots, a_n)$  表示边  $(a_0, a_1, \dots, a_{n-1}) \rightarrow (a_1, \dots, a_{n-1}, a_n)$ .

$G_n(m)$  有  $m^n$  个顶点,  $m^{n+1}$  条边, 于是一个  $n$  级  $m$  元  $M$  序列相当于  $G_n(m)$  的一个 Hamilton 圈, 也相当于  $G_{n-1}(m)$  的一条 Euler 回路.  $G_n(m)$  是连通拟正则图, 对每个顶点  $x$ , 有  $d^+(x) = d^-(x) = m$ . 将  $G_n(m)$  的顶点按字典序列排列

$V = \{(0, \dots, 0, 0), (0, \dots, 0, 1), \dots, (0, \dots, 0, m-1), (0, \dots, 0, 1, 0), (0, \dots, 0, 1, 1), \dots, (m-1, \dots, m-1)\}$ . 于是有  $G_n(m)$  的联系矩阵为

$$A = \begin{pmatrix} \overbrace{1 \cdots 1}^m & 0 \cdots 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 \cdots 0 & \overbrace{1 \cdots 1}^m & 0 & \cdots & 0 \\ 0 \cdots 0 & 0 \cdots 0 & \overbrace{1 \cdots 1}^m & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 \cdots 0 & 0 \cdots 0 & 0 \cdots 0 & \cdots & \overbrace{1 \cdots 1}^m \\ 1 \cdots 1 & 0 \cdots 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{m^2 \times m^2}$$

易知  $A$  是  $m$ -循环的. 由  $\gcd(m^2, m) = m > 1$ , 对  $A$  作一系列分块, 得到矩阵  $\sum_{m^{n-1}}^{(1)}, \sum_{m^{n-2}}^{(2)}, \dots, \sum_{m^1}^{(n-1)}$ , 其中  $\sum_{m^{i-1}}^{(i)}$  是  $m^{i-1}$  阶  $m$ -循环矩阵,  $i = 1, 2, \dots, n-2$ . 由于  $\sum_{m^{n-1}}^{(n-1)}$  是 0-循环矩阵且  $\sum_{m^{n-1}}^{(n-1)} = E_{m^n}$ . 容易求出它的特征根为  $m$  (一重) 和  $0$  ( $m-1$ 重). 对  $\sum_{m^{i-1}}^{(i)}$  反复利用引理 8 ( $i = n-2, n-3, \dots, 1$ ) 可得  $A$  的特征根为  $m$  (一重) 和  $0$  ( $m^2-1$ 重). 由于  $D = mE_{m^2}$ , 从而  $D - A = M \sum_{m^1}^{(1)} - A$  的特征根为  $0$  (一重) 和  $m(m^2-1)$  (重), 又由于  $D - A$  的行和与列和均为零, 由引理 6 可得  $\Delta_1 = m^{m^2-1} \cdot m^{-1} = m^{m^2-(n+1)}$ . 由引理 3 知  $G_n(m)$  中 Euler 回路个数为  $((m-1)!)^{m^2} \cdot m^{m^2-(n+1)}$ , 从而证明了

**定理 5**  $G_n(m)$  中 Euler 回路个数为  $[(m-1)!]^{m^2} \cdot m^{m^2-(n+1)}$

**定理 6**  $n$  级  $M$  序列个数为  $[(m-1)!]^{m^2-1} \cdot m^{m^2-1-n}$ .

### 参 考 文 献

- [1] Esfahanian A H and Hakimi S L, *IEEE Trans. Comput.*, C-34(1985), 777-788.
- [2] Pradhan D K, Fault-tolerant multiprocessor and VLSI-based systems communication architecture. In *Fault Tolerant Computing Theory and Techniques*, Vol. I (ed. D. K. Pradhan), Prentice-Hall, Englewood cliffs, NJ(1986).
- [3] Du D Z and Hwang F K, *Networks*, 18 (1988), 27-38.
- [4] Berge C, *Graphs and Hypergraphs*, North-Holland Publishing Company, 1973.
- [5] Ablow C M and Brenner J L, *Roots and Canonical Forms for Circulant Matrices*. TAMS. 1963, May. 360-377.

## Enumeration of Euler Circuits and Hamilton Cycles in Generalized de Bruijn Digraphs

Hu Lungmei

(Institute of Informational Engineering)

### Abstract

The number of Euler circuits in line digraphs of generalized de Bruijn digraphs is discussed, and the enumeration theorems of Hamilton cycles in generalized de Bruijn digraphs are presented.

**Key words:** generalized de Bruijn digraphs, Euler circuits, Hamilton cycles

# 快速断面图象轮廓间插值

汪炳权 罗 斌

(安徽大学)

## 摘 要

本文提出一种快速断面轮廓间插值方法。以给定分段点数轮廓多边形近似方法为基础,通过各对应多边形分段点间的线性插值,完成从一个断面轮廓到另一个断面轮廓的快速插值。文中给出了快速插值的结果,及使用该结果得到的一个人体器官三维显示的实例。

关键词: 插值,轮廓,多边形近似,三维显示

中图法分类号: TP391.41

## 1 引言

断层图象的获得为无损检测提供了重要手段。在医学领域,利用 X 线 CT (Computerized Tomography), 放射性核素 CT, 超声 CT 和核磁共振 CT 等技术, 获得人体断层图象, 提供人体内部有关病变的信息, 给诊断疾病带来极大的方便。近年来, 许多人致力于研究从二维断层图象序列重建并显示三维物体, 发表了一些文章<sup>[1]</sup>。由于直接获得的断层图象, 在断面内分辨率比断面间分辨率高得多, 故在断面间要进行插值, 以得到物体完整的三维结构。

从断层图象序列重建三维物体及显示, 最简单的是单个物体的重建及显示。物体在断面上留下轮廓信息。数字化后的轮廓用连通的点列表示, 断面轮廓间插值转换成两对应点列间插值。

Gujar 等人<sup>[2]</sup>给出基于断面轮廓参数方程的线性和非线性插值方法, 可得到满意的插值结果。Raya 和 dupa<sup>[3]</sup>提出了基于轮廓形状的插值方法, 并给出一般算法及快速算法, 但算法的运算量较大。Wei-Chung Lin 等人<sup>[4]</sup>提出的动态弹性插值法在两轮廓上施加作用力, 实现插值, 运算量也较大, 且对一轮廓有凹陷部分, 另一轮廓较平滑的情况不适用。

在允许存在一定误差的情况下,用较少的离散点列形成多边形来近似表示轮廓,减少了运算量.通常在计算之前,多边形顶点的个数,即多边形近似分段点的个数是未知的.我们首先提出一种给定分段点个数轮廓多边形近似方法,对各轮廓用固定顶点数的多边形来近似,继而提出一种快速断面轮廓间插值方法,将轮廓的插值转换为对应点列间的插值.最后,得到了多边形近似表示断面轮廓的结果及快速断面轮廓间插值的结果.与动态弹性插值方法相比,本方法运算量较小,且较好地处理一轮廓有凹陷部分,而另一轮廓较平滑的情况,不需要在程序中设置可变参量,插值结果令人满意.

## 2 给定分段点数轮廓多边形近似

先给定最大误差距离  $e$  和分段点数(用  $N$  表示),然后分两步进行轮廓多边形近似.一级近似,不考虑分段点的个数,仅根据最大误差距离  $e$  来确定分段点.给定初始分段点,寻找满足下列条件的后继点  $P$  作为下一个分段点,即该后继点与初始分段点之间任一轮廓点形成的直线到初始分段点的距离  $d \geq e$ ;二级近似分两种情况考虑,当一级近似分段点数  $N_1 > N$  时,计算各相邻分段点形成线段之间的夹角,进行排序,删除夹角大即轮廓曲率较小处的分段点,当  $N_1 < N$  时,计算各相邻分段点间的距离,进行排序,在距离较大的分段点间插入一新的分段点,使二级近似分段点数  $N_2 = N$ ,从而完成给定分段点数和最大误差情况下,尽量保留轮廓细节信息的多边形近似.

轮廓分段点数  $N$  和最大误差距离  $e$  一般可通过实验选定.  $N$  主要取决于原始轮廓像素个数.原始轮廓像素数多,  $N$  应取大些,否则,  $N$  取小些.  $e$  主要取决于原始轮廓的光滑程度,轮廓光滑,  $e$  应取得小些,否则,  $e$  取大些.

实际轮廓形状各异,预先给定合适的  $N$  和  $e$  较为困难,而且  $N$  越大,  $e$  越小,所得分段点数就越多,势必影响轮廓插值的速度.因此,选取  $N$  和  $e$ ,要在分段点与轮廓近似误差之间折衷考虑,以确定合适的  $N$  和  $e$  值.

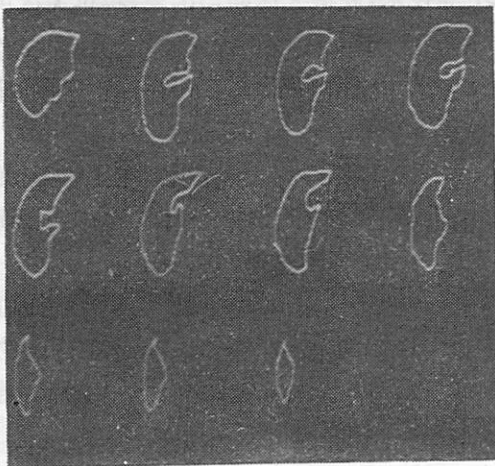


图 1 原始轮廓图象

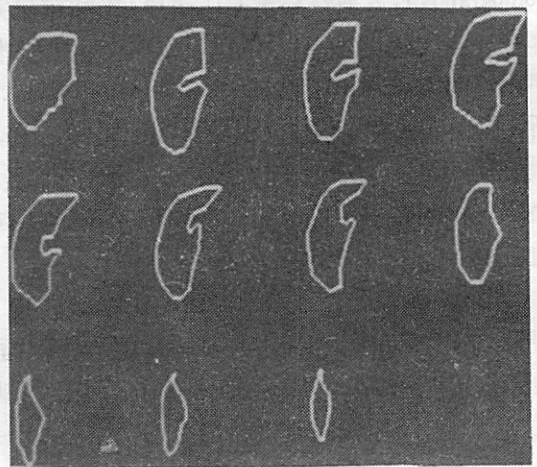


图 2 多边形近似结果图象

我们得到安徽医科大学附属医院提供的十一幅人体肝脏部位 X-CT 图象. 对每幅图象进行分割, 提取出肝脏轮廓图象如图 1 所示. 用上述方法对各轮廓作多边形近似. 图 1 中十一幅原始轮廓图象、像素个数在 90 到 222 之间, 轮廓形状相差较大. 据此, 通过实验, 确定  $N=20, e=1$  (即两个相邻像素间的距离). 得到了满意的多边形近似结果, 如图 2 所示.

### 3 快速断面轮廓间插值方法

给定多边形分段点数为 20, 轮廓跟踪处理时初始点的选择、跟踪的方向都是确定的. 在这种条件下, 按两轮廓对应分段点间距离进行线性插值运算.

#### 3.1 位移矢量的计算

要在轮廓 A 和轮廓 B 间进行插值, 首先将轮廓表示为

$$\text{轮廓 } A: \{x_{ai}, y_{ai} | i=1, 2, \dots, N\}$$

$$\text{轮廓 } B: \{x_{bi}, y_{bi} | i=1, 2, \dots, N\}$$

$(x_{ai}, y_{ai})$  和  $(x_{bi}, y_{bi})$  分别为轮廓 A 和轮廓 B 上多边形顶点的坐标值.

两轮廓间的关系用相对距离表示, 定义为街区距离. 则各对应点位移矢量为

$$d = (x_{bi} - x_{ai})k + (y_{bi} - y_{ai})j \quad i = 1, 2, \dots, N$$

令中间轮廓数为  $K$ , 则本插值方法在两轮廓对应分段点间等距离地插入  $K$  个中间点, 作为第  $K$  个中间轮廓的分段点, 见图 3

#### 3.2 中间轮廓的计算

轮廓 A 和 B 对应分段点位移矢量求出后, 因本方法只需考虑点的位移关系, 所以, 中间插值轮廓的计算转换为中间轮廓各分段点的计算.

中间轮廓分段点用  $(x_{ij}, y_{ij})$  表示,  $i=1, 2, \dots, N, j=1, 2, \dots, N$ , 则

$$x_{ij} = x_{ai} + \Delta x \cdot j$$

$$y_{ij} = y_{ai} + \Delta y \cdot j$$

其中  $\Delta x = (x_{bi} - x_{ai}) / (K + 1)$

$$\Delta y = (y_{bi} - y_{ai}) / (K + 1)$$

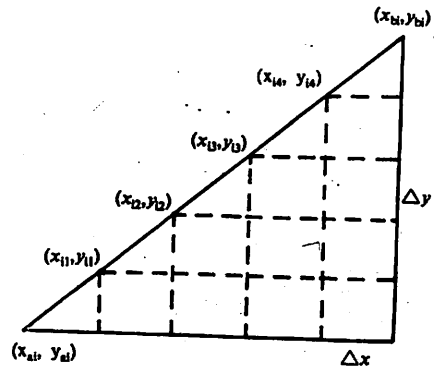


图 3 中间轮廓分段点的计算

#### 3.3 程序框图

图 4 为快速断面轮廓间插值的程序框图. 分为三部分, 第一部分对轮廓图象进行一级分段近似, 第二部分对一级近似的结果作二级分段近似, 使二级分段近似的分段点数等于给定的分段点数, 第三部分计算中间插值轮廓.

图 5 给出三幅插值结果图象. 每幅图象的左上角轮廓和右下角轮廓为原始多边形近似的肝脏轮廓, 中间四个轮廓, 从上到下, 从左到右依次为 1、2、3、4 次插值的中间轮廓.



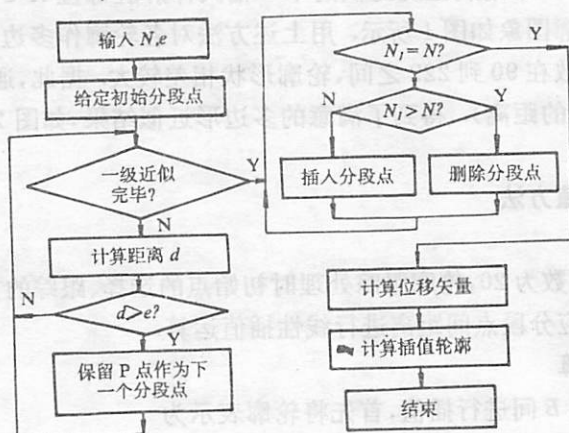


图 4 轮廓插值程序框图

(a)图中两原始轮廓形状相差较大,左上轮廓比右下轮廓规则;(b)图中两个轮廓形状相差不大;(c)图中两原始轮廓形状相差也较大,左上轮廓比右下轮廓复杂.对上述各种情况,我们提出的快速插值方法插值效果均较好,插值后轮廓变化均匀.

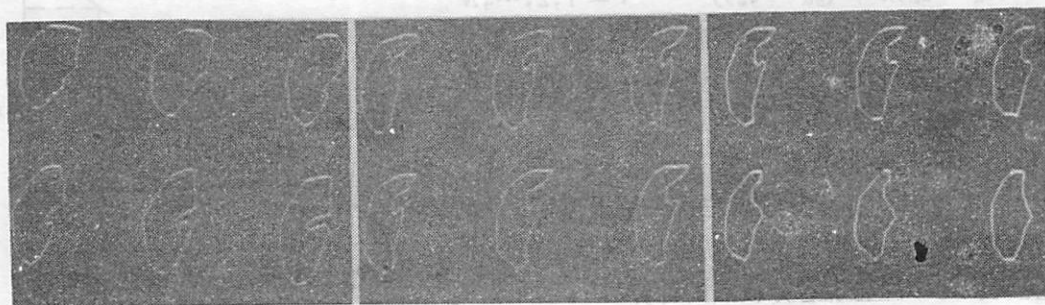


图 5 实际插值结果

#### 4 讨论

我们编制的程序实现了动态弹性轮廓插值方法及本文的快速断面图像轮廓间插值方法.实验证明,该方法运算量较小,插值速度快,而且当一轮廓有凹陷部分,而另一轮廓较平滑时,插值效果仍然很好.另外运算中可变参量较少,便于使用和调整.

用插值得到的各断面轮廓,经轮廓填充后,用 Frieder 和 Gordon 的 BTF 方法<sup>[5]</sup>及 Gordon 的象空间明暗显示方法<sup>[6]</sup>,我们实现了对应上述十一幅 CT 图象的人体肝脏 3D 可见表面显示,如图 6 所示,(a)图的显示角度为  $A=0^\circ, B=0^\circ, C=110^\circ$ , (b)图的显示角度为  $A=0^\circ, B=45^\circ, C=110^\circ$ .

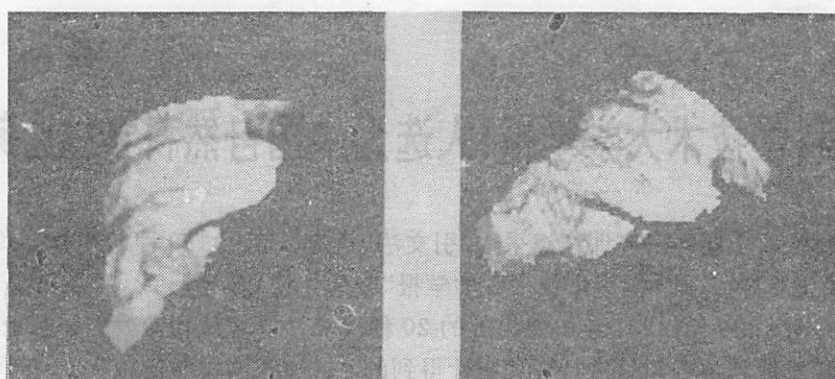


图6 人体肝脏三维表面的显示

## 参 考 文 献

- [1] Chen Linshyann and Marc R. Suntag, *CVGIP* 48, (1989), 190-216.
- [2] Uday G G, Virendra C B *et al.*, *Comput. & Graphics*, 12(1988), Nos. 3/4, 541-555.
- [3] Sai Prasad Raya, Jayaram K U, *IEEE Trans. Med. Imaging*, 9(1990), No. 1, 32-42.
- [4] Lin Weichung, Liang Chengchung *et al.*, *IEEE Trans. Med. Imaging*, 7(1988), No. 3, 225-232.
- [5] Frieder G, Gordon D *et al.*, *IEEE CG&A*, 1985, January, 52-60
- [6] Dan Gordon, *CVGIP*, 29(1985), 361-376.

## Fast Interpolation Between Cross-Sectional Contours

Wang Bingquan Luo Bin

(Anhui University)

## Abstract

A fast interpolation method for cross-sectional contours is presented in this paper. Based on a polygonal approximation method that gets polygons with the same number of segment points, the fast interpolation from one contour to another can be realized by linear interpolation between each pair of segment points in two contours. The result is presented and the 3D display of an object from cross-sectional images is also realized.

**Key words:** interpolate, contour, polygonal approximation, 3D display

## 《中国科学技术大学学报》入选为中国自然科学核心期刊

中国自然科学核心期刊研究课题组采用“引文法”最近公布了 100 种期刊为“1990~1991 年中国自然科学核心期刊”。《中国科学技术大学学报》遴选为核心期刊。

这一结果是对 1990 年、1991 年中国出版的 20 种代表性学术期刊发表的学术论文所引用的各种中文自然科学期刊被引用量进行客观统计得到的。目前我国每年出版 3000 多种科技期刊，核心期刊比例仅占 3.33%。

1990—1991 年中国自然科学核心期刊百名表

1 科学通报	35 南京大学学报(自然科学版)	69 动物学杂志
2 中国科学	36 中国稀土学报	70 中国激光
3 化学学报	37 地质论评	71 气象
4 物理学报	38 光学学报	72 生物物理学报
5 高等学校化学学报	39 催化学报	73 化学物理学报
6 植物学报	40 应用化学	74 结构化学
7 药学报	41 数学年刊	75 冰川冻土
8 生物化学与生物物理学报	42 生物化学杂志	76 上海医科大学学报
9 植物生理学报	43 色谱	77 云南植物研究
10 分析化学	44 地球物理学报	78 中华血液学杂志
11 生理学报	45 化学试剂	79 兰州大学学报(自然科学版)
12 遗传学报	46 石油化工	80 自然杂志
13 化学通报	47 半导体学报	81 地理科学
14 地质科学	48 北京医科大学学报	82 中国地质科学院院报
15 气象学报	49 吉林大学自然科学学报	83 波谱学杂志
16 有机化学	50 古生物学报	84 分析试验室
17 动物学报	51 作物学报	85 力学学报
18 物理	52 遗传	86 分子科学与化学研究
19 地理学报	53 药物分析杂志	87 厦门大学学报(自然科学版)
20 数学学报	54 地球科学	88 海洋与湖泊
21 大气科学	55 武汉大学学报(自然科学版)	89 中国药科大学学报
22 物理化学学报	56 高原气象	90 动物学研究
23 中草药	57 生理科学进展	91 地理研究
24 植物生理学通讯	58 地震地质	92 中国区域地质
25 地质学报	59 中华内科杂志	93 中国药学杂志
26 中国药理学报	60 微生物学报	94 北京大学学报(自然科学版)
27 中华医学杂志	61 中国农业科学	95 中国科技大学学报
28 高分子学报	62 金属学报	96 应用数学学报
29 实验生物学报	63 中华肿瘤杂志	97 古脊椎动物与古人类
30 生物化学与生物物理进展	64 沉积学报	98 两栖爬行动物学报
31 地球化学	65 生物工程学报	99 军事医学科学院院刊
32 中国医学科学院学报	66 物理学进展	100 解剖学报
33 无机化学	67 中山大学学报(自然科学版)	
34 岩石学报	68 海洋学报	

## 《中国科学技术大学学报》入选为中文核心期刊

为了向各级各类图书情报部门提供中文期刊的收集依据和馆藏质量评价标准;为了向社会和读者推荐优秀期刊;为了向国内外各种文摘、索引提供最佳选择参考;并以此促进我国期刊编辑和出版水平的提高;北京地区和部分外省市的 40 余所高等学校图书馆(室)分工合作,研究并编制了《中文核心期刊要目总览》一书。

编制者采用引文分析法、文摘法、载文量法进行三次筛选,将筛选结果进行综合平衡必要的加权处理,再用一到二种其他方法加以验证,获得初步的核心期刊表。之后,以此表为基础,广泛征求有关专业人员的意见,400 多位专家教授分别对各类研究成果进行鉴定。根据专家的意见又作部分调整,获得最后的核心期刊表。

该书分为哲学社会科学、自然科学、医药卫生、农业科学、工程技术五大部分。按《中图法》体系分类排列。各类的核心期刊按序排列于每类之前,并有著录和简介。《中国科学技术大学学报》入选为核心期刊。

**中国科学技术大学学报**

Zhongguo Kexue Jishu Daxue Xuebao

(季刊, 1965 年创刊)

第 22 卷第 3 期 (总第 78 期) 1992 年 9 月出版

**Journal Of China University of**

**Science And Technology**

(Quarterly, Started in 1965)

Vol. 22 No. 3 (Sum. 78) Sep. 1992

编 辑: (中国科学技术大学学报)编辑部  
安徽省合肥市金寨路 96 号 (邮政编码 230026)

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 by: Editorial Board of Journal of China  
University Of Science and Technology  
96 Jinzhai Rd., Hefei 230026, Anhui, China

Printed by: Printing House of University of Science and  
Technology of China

Distributed by: China International Book Trading Coporation  
(P. O. Box 399 Beijing, China)