

ISSN 0253—2778

中国科学技术大学学报

第 22 卷

第 1 期

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 22

No. 1

1

1992

中国科学技术大学学报

第 22 卷 第 1 期 (总第 76 期)

目 录

单纯形上 Bernstein 多项式的渐近展开式及关于阶的高阶差分	李 平(1)
正态分布参数的经验 Bayes 检验	杨亚宁(12)
一类障碍问题解的内部正则性	朱梅俊(22)
铬-钼氧化物的催化活性和掺碱(土)元素的影响	单绍纯 陈少伟 伏义路(31)
量子能谱的非线性解法	朱栋培 石名俊 陈银华(38)
弹性波在两种液体饱和多孔介质界面上的反射和透射	吴昆裕 薛 强 Laszlo Adler(44)
记忆合金螺旋弹簧的性能测试及设计方法	杨 杰 吴月华 周榆生 张昌文 郭玉亭 邱自学(51)
天然富铁黑云母中 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 的有序-无序及其岩石学意义	杨学明 张培善(58)
γ 辐照 PET 的结构变化与偶极热松弛运动的研究	张兴元 周漪琴 章吉祥(64)

研究简报

高功率激光系统中的三程放大器	郭大浩 吴鸿兴 王声波 戴宇生 夏小平(70)
诱导弛豫速率法研究水溶液中镧系离子配合物结构	刘清亮 余华明 鲁 非 谢波平(74)
ICP-AES 法测定人体血清中的 Al, Be, Cu, Mn, Mo, V 元素	曹洪奎 王文荣 魏军素 张凤友 张继荣(79)
变截面激波管中激波运动规律的初步数值研究	欧阳良彪(83)
高精度电感式外径检测仪	李智群 陈岭丽 沈兰荪 王英英(90)
用于介形类化石识别及岩芯分析的人工神经网络方法	林 文 陈学俭(95)

谐振梁式测力传感器动态参数识别.....	王琪民	张培强	唐新鲁	马 薇(100)	
Na ₅ Ho(WO ₄) ₄ 晶体的生长、结构及光谱性质	姚连增	程庭柱	阮耀钟	张裕恒(106)	
微波等离子体化学气相淀积 ZrO ₂ 薄膜的表面形貌研究	曹传宝	喻维杰	孟广耀	彭定坤	李凡庆(111)
具有多极缓冲的快速光子计数器	彭 虎	周佩玲	姚 焜	郭光灿(119)	
格雷码色标微机检测系统.....	吴耿锋	万炳奎	顾雨民	郭明明	贺关华(123)

(续前页) 编 者 表

(101) 李 强
(102) 李 强
(103) 李 强
(104) 李 强
(105) 李 强
(106) 李 强
(107) 李 强
(108) 李 强
(109) 李 强
(110) 李 强
(111) 李 强
(112) 李 强
(113) 李 强
(114) 李 强
(115) 李 强
(116) 李 强
(117) 李 强
(118) 李 强
(119) 李 强
(120) 李 强
(121) 李 强
(122) 李 强
(123) 李 强
(124) 李 强
(125) 李 强
(126) 李 强
(127) 李 强
(128) 李 强
(129) 李 强
(130) 李 强

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF
SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 22, No. 1 (Sum No. 76)

CONTENTS

Asymptotic Expansion for Bernstein Polynomials Defined on a Simplex and the Higher Difference About Degree *Li Ping* (1)

The EB Test for the Parameter of Normal Distribution Family *Yang Yaning* (12)

Local $C^{1,\alpha}$ Regularity of Solution for Certain Obstacle Problem *Zhu Meijun* (22)

Effect of Alkali (Alkali Earth) Doping on the Catalytic Activity of Cr-Ce- Al_2O_3 in the Oxidation of Toluene *Shan Shaochun, Cheng Shaowei, Fu Yilu* (31)

A Non-Linear Approach of Determining Quantum Energy Spectrum *Zhu Dongpei, Shi Mingjun, Chen Yinhua* (38)

Reflection and Transmission of Elastic Waves at the Interface of Two Fluid-Saturated Porous Media *Wu Kunyu, Xue Qiang, Laszlo Adler* (44)

Characteristic Measurement and Design for Helical Spring of Shape Memory Alloy *Yang Jie, Wu Yuehua, Zhou Yushen, Zhang Changwen, Wu Yuting, Qiu Zizue* (51)

The Order-Disorder of Fe^{2+} and Fe^{3+} in Natural Iron-Rich Biotite and Their Significances for Petrology *Yang Xueming, Zhang Peishan* (58)

Study of Structure and the Dipolar Thermal Relaxation on γ -Irradiated Poly (Ethylene Terephthalate) Films *Zhang Xiangyuan, Zhou Yiqin, Zhang Jixiang* (64)

Research Notes

Triple-Pass Amplifier in High Power Laser System *Guo Dahao, Wu Hongxing, Wang Shengbo, Dai Yusheng, Xia Xiaoping* (70)

The Structural Study Lanthanide Complex With Nicotinic Acid in Aqueous Solution by Induced Relaxation Ratio Method *Liu Qingliang, Yu Huaming, Lu Fei, Xie Boping* (74)

Simultaneous Analysis of Al, Be, Cu, Mn, Mo and V in Human Serum by ICP-AES

.....	<i>Cao Hongkui, Wang Wenrong, Wei Junsu, Zhang Fengyou, Zhang Jirong</i>	(79)
Numerical Solution of Shocks' Motion in a Section-Changed Shocktube		
.....	<i>Ouyang Liangbiao</i>	(83)
High Precision Inductance Outer Diameter Detector		
.....	<i>Li Zhiqin, Chen Lingli, Shen Lansun, Wang Yingying</i>	(90)
The Artificial Neural Network Method in Mussel-Shrimp Fossil Recognition and Core		
.....	<i>Lian Wen, Chen Xuequan</i>	(95)
Dynamic Parameters Identification of Resonator Force Sensor		
.....	<i>Wang Qimin, Zhang Peiqiang, Tang Xinlu, Ma Wei</i>	(100)
Study on Growth Structure and Spectral Properties of $\text{Na}_3\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ Single Crystal		
.....	<i>Yao Lianzeng, Cheng Tingzhi, Ruan Yaoshong, Zhang Yuheng</i>	(106)
Research on Surface Morphology of ZrO_2 Thin Filma Deposited by Microwave Plasma Assisted CVD Process		
.....	<i>Cao Chuanbao, Yu Weijie, Meng Guangyao, Peng Dingkun, Li Fanqing</i>	(111)
A Fast Photo-Counter With Multi-Level Buffers		
.....	<i>Peng Hu, Zhou Peling, Yao Kun, Guo Guangcan</i>	(119)
Microcomputer-Based Detecting System for Gray Mark Recognition		
.....	<i>Wu Gengfeng, Wan Bingkui, Gu Yuming, He Guanhua</i>	(123)

Asymptotic Expansion for Bernstein Polynomials Defined on a Simplex and the Higher Difference About Degree*

Li Ping

(Department of Mathematics)

Abstract

This paper gives an estimation of error for the difference of two consecutive Bernstein polynomials defined on a simplex and gives an asymptotic expansion of Bernstein polynomial. Finally, the higher difference about the degree of Bernstein polynomials is discussed.

Key words: Bernstein polynomial, simplex, asymptotic expansion, difference

AMS Subject Classifications (1991): 41A60

1 Introduction

For a function defined on $[0, 1]$, the n -th Bernstein polynomial associated with f is denoted by

$$B_n(f) = B_n(f, x) = \sum_{i=0}^n f\left(\frac{i}{n}\right) \binom{n}{i} x^i (1-x)^{n-i}$$

In [4] it could be found that if $f \in C^2[0, 1]$, then the following asymptotic expansion

$$B_n(f, x) = f(x) + \sum_{k=1}^{2s} \frac{1}{k!} n^{-k} f^{(k)}(x) T_{n,k}(x) + e_n n^{-s} \quad (1)$$

holds, where $e_n \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$ and

$$T_{n,k}(x) = \sum_{i=0}^n (i - nx)^k \binom{n}{i} x^i (1-x)^{n-i} \quad (2)$$

Recently, several authors have worked at the generalization of the asymptotic expansion to the Bernstein polynomials defined on a simplex. For example, in [1], [2] it is proved that for $f \in C^2(\sigma)$ one has

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n(B_n(f) - f) = A_1 f \quad (3)$$

where

$$A_1 = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=0}^m \lambda_i \frac{\partial^2}{\partial \lambda_i^2} - \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^2}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \right] \quad (4)$$

here $\lambda = (\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m)$ is barycentric coordinate of the point x with respect to the simplex σ . In [3], for $f \in C^{2s}(\sigma)$ the author obtained an asymptotic expansion formula, a.e

$$B_n(f) = f + \sum_{k=1}^{2s} \sum_{|\alpha|=k} \frac{1}{n^k} \frac{T_{\alpha}(\lambda)}{\alpha!} D_{\alpha} f + \varepsilon_n n^{-s} \quad (5)$$

where

$$T_{\alpha}(\lambda) = \sum_{|\beta|=|\alpha|} (\beta - n\lambda)^{\alpha} B_{\beta}(\lambda) \quad (6)$$

and calculated the limit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [n(B_n f - f) - A_1 f] = A_2 f \quad (7)$$

for $f \in C^4(\sigma)$, where

$$\begin{aligned} A_2 = & \frac{1}{6} \sum_{i=0}^m \lambda_i \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^3} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j} + \frac{1}{3} \sum_{i,j,k=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j \partial \lambda_k} \\ & + \frac{1}{8} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^4}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j^2} - \frac{1}{4} \sum_{i,j,k=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \frac{\partial^4}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j \partial \lambda_k} \\ & + \frac{1}{8} \sum_{i,j,k,l=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \lambda_l \frac{\partial^4}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j \partial \lambda_k \partial \lambda_l} \end{aligned} \quad (8)$$

In this paper we will first give an estimation of error for the difference of two consecutive Bernstein polynomials defined on a simplex. Based upon the estimation we give an asymptotic expansion as the form

$$B_n f = f + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{n^k} A_k f + \varepsilon_n n^{-r}$$

where ε_n converges to zero uniformly as n goes to infinity, and A_k , which can be obtained from a recurrence formula, is a nonlinear partial differential operator of order $2k$. In the fourth section, we will discuss the higher difference about the degree of Bernstein polynomials and obtain a limit formula.

To begin, it is necessary to introduce some notation and terminology. Let $v^i \in R^m, i=0, 1, \dots, m$ be $m+1$ affinely independent points in R^m . σ is the m -simplex associated with $v^i, i=0, 1, \dots, m$. That is

$$\sigma = [v^0, v^1, \dots, v^m] = \text{convexhull}\{v^0, v^1, \dots, v^m\}$$

The barycentric coordinates of $x = (x_1, x_2, \dots, x_m) \in R^m$ with respect to σ are denoted by $\lambda = \lambda(\sigma, x) = (\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m)$. Therefore

$$x = \sum_{i=0}^m \lambda_i v^i, \quad \sum_{i=0}^m \lambda_i = 1$$

It is obvious that λ belongs to the standard m -simplex $D = \{(\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m) \in R^{m+1}; 0 \leq \lambda_i \leq 1, i=0, 1, \dots, m, \sum_{i=0}^m \lambda_i = 1\}$ for $x \in \sigma$. Let f be a function defined on σ , we write $f(\lambda(\cdot)) = f(x), \lambda = \lambda(\sigma, x)$. In barycentric coordinates the n -th Bernstein polynomials associated with f can be expressed by

$$B_n(f) := B_n(f, \lambda) := \sum_{|\alpha|=n} f\left(\frac{\alpha}{n}\right) B_\alpha(\lambda) \quad (9)$$

where

$$B_\alpha(\lambda) := \binom{|\alpha|}{\alpha} \lambda^\alpha, \quad |\alpha| = n \leq \sum_{i=0}^m n_i \quad (10)$$

are the n -th Bernstein polynomial basic functions; here

$$\alpha := (\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m) \in \mathbb{Z}_+^{m+1}$$

$$|\alpha| := \alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_m$$

$$\lambda^\alpha := \lambda_0^{\alpha_0} \lambda_1^{\alpha_1} \dots \lambda_m^{\alpha_m}$$

$$\binom{|\alpha|}{\alpha} = \binom{n}{\alpha} := \frac{n!}{\alpha!}$$

$$\alpha! := \alpha_0! \alpha_1! \dots \alpha_m!$$

The derivation can be simplified to

$$D_\alpha := \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial \lambda_0^{\alpha_0} \partial \lambda_1^{\alpha_1} \dots \partial \lambda_m^{\alpha_m}}$$

For convenience, we introduce the unit vectors in \mathbb{R}^{m+1}

$$e^i := (\underbrace{0, \dots, 0}_{i \text{ zeros}}, \underbrace{1, 0, \dots, 0}_{m-i \text{ zeros}}) \in \mathbb{R}^{m+1}, \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

and the notations

$$e_j^i := \begin{cases} 1, & j = i, \\ 0, & j \neq i \end{cases}$$

For $f \in C^k(\sigma)$, we also denote the modulus of continuity of f by

$$\omega_k(\delta) := \max_{|\alpha|=k} \max_{\|\lambda - \mu\| \leq \delta} |D_\alpha f(\lambda) - D_\alpha f(\mu)| \quad (11)$$

where $\lambda = (\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m), \mu = (\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_m) \in D$, and

$$\|\lambda - \mu\| := \left[\sum_{i=0}^m (\lambda_i - \mu_i)^2 \right]^{1/2}$$

2 The Estimation of Error for $B_n f - B_{n+1} f$

Theorem 1 Let $f \in C^k(\sigma)$, we have

$$|B_n(f, \lambda) - \sum_{i=0}^k \frac{1}{n^i} B_{n+1}(F_i f, \lambda)| \leq \frac{2^k \omega_k(\frac{2}{n})}{n^k s!} B_{n+1}(g_s, \lambda) \quad (12)$$

where F_i is the following nonlinear partial differential operator of order k

$$F_i f(\lambda) := \sum_{|\alpha|=i} \frac{1}{\alpha!} \sum_{j=0}^m \lambda_j (\lambda - e^j)^\alpha D_\alpha f(\lambda) \quad (13)$$

and g_s is the polynomial

$$g_s(\lambda) := \sum_{i=0}^m \lambda_i (1 - \lambda_i)^s \quad (14)$$

Proof For Bernstein polynomials, we have the formula of degree elevation (see [1])

$$B_n(f, \lambda) = \sum_{|\beta|=n+1} \sum_{i=0}^n \frac{\beta_i}{n+1} f\left(\frac{\beta-e^i}{n}\right) B_\beta(\lambda) \quad (15)$$

Let $f \in C^s(\sigma)$, according to the Taylor theorem, we have

$$f(\lambda) = \sum_{i=0}^s \sum_{|\alpha|=i} \frac{1}{\alpha!} (\lambda - \mu)^\alpha D_\alpha f(\mu) + \sum_{|\alpha|=s} \frac{1}{\alpha!} (\lambda - \mu)^\alpha S_\alpha(\theta) \quad (16)$$

where $S_\alpha(\theta) = D_\alpha f(\lambda(\theta)) - D_\alpha f(\mu)$, $\lambda(\theta) = \mu + \theta(\lambda - \mu)$, $0 < \theta < 1$.

Let us replace λ by $\frac{\beta-e^i}{n}$ and μ by $\frac{\beta}{n+1}$, from

$$\left(\frac{\beta-e^i}{n} - \frac{\beta}{n+1}\right)^\alpha = \frac{1}{n^{|\alpha|}} \left(\frac{\beta}{n+1} - e^i\right)^\alpha$$

we obtain

$$f\left(\frac{\beta-e^i}{n}\right) = \sum_{i=0}^s \frac{1}{n^i} \sum_{|\alpha|=i} \frac{1}{\alpha!} \left(\frac{\beta}{n+1} - e^i\right)^\alpha D_\alpha f\left(\frac{\beta}{n+1}\right) + \frac{1}{n^s} \sum_{|\alpha|=s} \frac{1}{\alpha!} \left(\frac{\beta}{n+1} - e^i\right)^\alpha S_\alpha(\theta_i)$$

where $\theta_i \in (0, 1)$, $i=0, 1, \dots, sn$, and it follows that

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^n \frac{\beta_i}{n+1} f\left(\frac{\beta-e^i}{n}\right) &= \sum_{i=0}^s \frac{1}{n^i} \sum_{|\alpha|=i} \frac{1}{\alpha!} \sum_{i=0}^n \frac{\beta_i}{n+1} \left(\frac{\beta}{n+1} - e^i\right)^\alpha D_\alpha f\left(\frac{\beta}{n+1}\right) \\ &\quad + \frac{1}{n^s} \sum_{|\alpha|=s} \frac{1}{\alpha!} \sum_{i=0}^n \frac{\beta_i}{n+1} \left(\frac{\beta}{n+1} - e^i\right)^\alpha S_\alpha(\theta_i) \\ &= \sum_{i=0}^s \frac{1}{n^i} F_i f\left(\frac{\beta}{n+1}\right) + \frac{1}{n^s s!} \sum_{|\alpha|=s} \binom{|\alpha|}{\alpha} \sum_{i=0}^n \frac{\beta_i}{n+1} \left(\frac{\beta}{n+1} - e^i\right)^\alpha S_\alpha(\theta_i) \end{aligned} \quad (17)$$

Multiply (17) by $B_\beta(\lambda)$ and sum for $|\beta|=n+1$, then from (15) we obtain

$$B_n(f, \lambda) = \sum_{i=0}^s \frac{1}{n^i} B_{n+1}(F_i f, \lambda) + \frac{1}{n^s s!} \sum_{|\alpha|=s} \binom{|\alpha|}{\alpha} \sum_{|\beta|=n+1} \sum_{i=0}^n \frac{\beta_i}{n+1} \left(\frac{\beta}{n+1} - e^i\right)^\alpha S_\alpha(\theta_i) B_\alpha(\lambda) \quad (18)$$

Clearly,

$$\left\| \frac{\beta-e^i}{n} - \frac{\beta}{n+1} \right\| = \frac{1}{n} \left\| \frac{\beta}{n+1} - e^i \right\| \leq \frac{2}{n}$$

hence from the form (11)

$$|S_\alpha(\theta_i)| = |D_\alpha f(\lambda(\theta_i)) - D_\alpha f\left(\frac{\beta}{n+1}\right)| \leq \omega_{|\alpha|}\left(\frac{2}{n}\right) \quad (19)$$

Since

$$\left| \sum_{|\alpha|=s} \binom{|\alpha|}{\alpha} \left(\frac{\beta}{n+1} - e^i\right)^\alpha \right| \leq \left(\sum_{j=0}^n \left| \frac{\beta_j}{n+1} - e^j \right| \right)^s = \left(2 - 2 \frac{\beta_i}{n+1} \right)^s = 2^s \left(1 - \frac{\beta_i}{n+1} \right)^s$$

from the forms (18), (19), we obtain

$$\begin{aligned} |B_n(f, \lambda) - \sum_{i=0}^s \frac{1}{n^i} B_{n+1}(F_i f, \lambda)| &\leq \frac{2^s \omega_s\left(\frac{2}{n}\right)}{n^s s!} \sum_{|\beta|=n+1} \sum_{i=0}^n \frac{\beta_i}{n+1} \left(1 - \frac{\beta_i}{n+1}\right)^s B_\beta(\lambda) \\ &= \frac{2^s \omega_s\left(\frac{2}{n}\right)}{n^s s!} B_{n+1}(g_s, \lambda) \end{aligned}$$

which completes the proof.

In order to calculate F_k , it is convenient to introduce the following function

$$G_\sigma(\lambda) = \sum_{i=0}^m \lambda_i (\lambda - e^i)^\sigma \quad (20)$$

With the introduction of $G_\sigma(\lambda)$, the form (13) can be expressed by

$$F_k f(\lambda) = \sum_{|\alpha|=k} \frac{1}{\alpha!} G_\sigma(\lambda) D_\alpha f(\lambda) \quad (21)$$

and it is easy to verify the following recurrence formula

$$G_{\sigma+1}(\lambda) = \lambda_i G_\sigma(\lambda) - \lambda_i (\lambda - e^i)^\sigma \quad (22)$$

From (21) and (22), it is not difficult to get

$$F_0 = I \text{ (identity operator)}$$

$$F_1 = 0$$

$$F_2 = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=0}^m \lambda_i \frac{\partial^2}{\partial \lambda_i^2} - \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^2}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \right] \quad (23)$$

$$F_3 = -\frac{1}{6} \sum_{i=0}^m \lambda_i \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^3} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j} - \frac{1}{3} \sum_{i,j,k=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j \partial \lambda_k} \quad (24)$$

$$F_4 = \frac{1}{24} \sum_{i=0}^m \lambda_i \frac{\partial^4}{\partial \lambda_i^4} - \frac{1}{6} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^4}{\partial \lambda_i^3 \partial \lambda_j} + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \frac{\partial^4}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j \partial \lambda_k} - \frac{1}{8} \sum_{i,j,k,l=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \lambda_l \frac{\partial^4}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j \partial \lambda_k \partial \lambda_l} \quad (25)$$

Corollary 1 If $f \in C^2(\sigma)$, then

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 (B_n f - B_{n+1} f) = F_2 f$$

Corollary 2 If $f \in C^2(\sigma)$, then

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n (B_n f - f) = F_2 f$$

Proof By the Stolz theorem and corollary 1

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n (B_n f - f) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(B_n f - f) - (B_{n+1} f - f)}{\frac{1}{n} - \frac{1}{n+1}} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^2 (B_n f - B_{n+1} f) = F_2 f \end{aligned}$$

From (23) we see that the conclusion of corollary 2 is in agreement with (3).

3 Expansion Theorem

Firstly, we denote the partial differential operators T_k and A_k by the following recurrence formula

$$\begin{aligned} A_0 &= F_0 = I, \quad T_1 = A_1 = F_2 \\ T_k &= F_{k+1} + \sum_{i=2}^k (\Delta^{k-i} A) F_i, \quad k \geq 2, \end{aligned} \quad (26)$$

$$A_k = \frac{1}{k} \left[T_k - \sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{k-i} \binom{k}{i-1} A_i \right], \quad k \geq 2 \quad (27)$$

$$\Delta^k A_i = \sum_{i=0}^k (-1)^{k-i} \binom{k}{i} A_{i+1}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (28)$$

Because F_2 is a partial differential operator of order 2, from the definitions (26) and (27) it is not difficult to know that T_i and A_i are partial differential operators of order $2k$. From (27), we can also obtain the identity

$$T_i = \sum_{i=1}^k (-1)^{k-i} \binom{k}{i-1} A_i \quad (29)$$

Now we give the asymptotic expansion of $B_n f$.

Theorem 2 If $f \in C^{2n}(\sigma)$, then

$$B_n f - B_{n+1} f = \sum_{i=1}^n \frac{1}{n^{i+1}} T_i f + \epsilon_n n^{-n-1} \quad (30)$$

$$B_n f = \sum_{i=0}^n \frac{1}{n^i} A_i f + \delta_n n^{-n} \quad (31)$$

where ϵ_n and δ_n tend to zero uniformly as n goes to infinity.

Proof Corollary 1 and corollary 2 show clearly that theorem 2 is correct for $s=1$. We suppose that theorem 2 is correct for $s=1, 2, \dots, N-1$. For $f \in C^{2N}(\sigma)$, from theorem 1 we have

$$B_n f - B_{n+1} f = \sum_{i=2}^{N+1} \frac{1}{n^i} B_{i+1}(F_i f) + \frac{o(1)}{n^{N+1}} \quad (32)$$

Because $F_i f \in C^{2N-1}(\sigma) \subset C^{2N-2i+2}(\sigma)$, $N-i+1 \leq N-1$, according to our hypothesis it holds that

$$\begin{aligned} B_{i+1}(F_i f) &= \sum_{i=0}^{N-i+1} \frac{1}{(n+1)^i} A_i F_i f + \frac{o(1)}{(n+1)^{N-i+1}} \\ &= \sum_{i=0}^{N-i} \frac{1}{(n+1)^i} A_i F_i f + \frac{A_{N-i+1} F_i f}{n^{N-i+1}} + \frac{o(1)}{N^{N-i+1}} \end{aligned}$$

thus

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^N \frac{1}{n^i} B_{i+1}(F_i f) &= \sum_{i=2}^N \frac{1}{n^i} F_i f \\ &+ \sum_{i=2}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-i} \frac{1}{n^i (n+1)^i} A_i F_i f \\ &+ \sum_{i=2}^N \frac{1}{n^{N+1}} A_{N-i+1} F_i f + \frac{o(1)}{n^{N+1}} \end{aligned} \quad (33)$$

On the other hand, from (26) and (28) we have

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{n^{i+1}} T_i f &= \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{n^{i+1}} [F_{i+1} f + \sum_{i=2}^i (\Delta^{i-i} A) F_i f] \\ &= \sum_{i=2}^N \frac{1}{n^i} F_i f + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{i=2}^i \frac{1}{n^{i+1}} (\Delta^{i-i} A) F_i f \\ &= \sum_{i=2}^N \frac{1}{n^i} F_i f + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{i=2}^i \sum_{j=0}^{i-1} \frac{(-1)^{i-i-j} \binom{i-j}{j}}{n^{i+1}} A_{j+1} F_i f \end{aligned}$$

Change the last sum of the above identity, we get

$$\sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{n^{i+1}} T_i f = \sum_{i=2}^N \frac{1}{n^i} F_i f + \sum_{i=2}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-i} \sum_{i=0}^{N-k-i} \frac{(-1)^{i+k-1} \binom{i+k-1}{k-1}}{n^{i+k+1}} A_k F_i f \quad (34)$$

and it follows that

$$B_s f - B_{s+1} f - \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{n^{i+1}} T_i f = \sum_{i=2}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-i} \frac{1}{n^i} \left[\frac{1}{(n+1)^i} - \sum_{l=0}^{i-1} \frac{(-1)^l}{n^{i+l}} \binom{i+k-1}{k-1} \right] A_i F_i f + \frac{1}{n^{N+1}} \sum_{i=2}^N A_{N-i+1} F_i f + \frac{1}{n^{N+1}} B_{s+1}(F_{N+1} f) + \frac{o(1)}{n^{N+1}} \quad (35)$$

since (32), (33) and (34)

From the expansion in power series of function $h(x) = (1+x)^t$, it holds that

$$\frac{1}{(n+1)^i} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{n^{i+l}} \binom{i+k-1}{k-1} \quad (36)$$

Take (36) into (35), we have

$$B_s f - B_{s+1} f - \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{n^{i+1}} T_i f = \frac{1}{n^{N+1}} \sum_{i=2}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-i} (-1)^{N-i-i+1} \binom{N-l}{k-1} A_i F_i f + \frac{1}{n^{N+1}} \sum_{i=2}^N A_{N-i+1} F_i f + \frac{1}{n^{N+1}} B_{s+1}(F_{N+1} f) + \frac{o(1)}{n^{N+1}} \quad (37)$$

thus

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{N+1} [B_s f - B_{s+1} f - \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{n^{i+1}} T_i f] \\ &= \sum_{i=2}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-i} (-1)^{N-i-i+1} \binom{N-l}{k-1} A_i F_i f + \sum_{i=2}^N A_{N-i+1} F_i f + F_{N+1} f \\ &= F_{N+1} f + \sum_{i=2}^N \sum_{k=1}^{N-i+1} (-1)^{N-i-i+1} \binom{N-l}{k-1} A_i F_i f \\ &= F_{N+1} f + \sum_{i=2}^N (\Delta^{N-i} A) F_i f \\ &= T_N f \end{aligned}$$

which shows (30) is correct for $s=N$. Now we prove that the form (31) is correct for $s=N$. Because (30) is correct for $s=N$, it follows that

$$B_s f - B_{s+1} f = \sum_{i=1}^N \frac{1}{n^{i+1}} T_i f + e_n n^{-N-1} \dots$$

Using Stolz theorem and the above form

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^N [B_s f - \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{n^i} A_i f] \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} n^{N+1} \left[\sum_{i=1}^N \frac{1}{n^{i+1}} T_i f - \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{1}{n^i} - \frac{1}{(n+1)^i} \right) A_i f \right] \quad (37) \end{aligned}$$

Take the following identity

$$\frac{1}{n^i} - \frac{1}{(n+1)^i} = \sum_{j=1}^{i-1} \frac{(-1)^{i-1}}{n^{i+1}} \binom{k+i-1}{i} + \frac{o(1)}{n^{N+1}}$$

and (29) into (37), we have

$$\begin{aligned}
 & \lim_{n \rightarrow \infty} n^N \left[B_n f - \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{n^k} A_k f \right] \\
 &= \frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow \infty} n^{N+1} \left[\frac{1}{n^{N+1}} T_N f + \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{i=1}^k \frac{(-1)^{k-i}}{n^{k+i}} \binom{k}{i-1} A_i f - \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-k+1} \frac{(-1)^{k-i}}{n^{k+i}} \binom{k+i-1}{i} A_i f \right] \\
 &= \frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow \infty} n^{N+1} \left[\frac{1}{n^{N+1}} T_N f + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{(-1)^{k-i}}{n^{k+i}} \binom{k+i-1}{i-1} A_i f - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-i+1} \frac{(-1)^{k-i}}{n^{k+i}} \binom{k+i-1}{i-1} A_i f \right] \\
 &= \frac{1}{N} \lim_{n \rightarrow \infty} n^{N+1} \left[\frac{1}{n^{N+1}} T_N f - \sum_{i=1}^{N-1} \frac{(-1)^{N-i}}{n^{N+1}} \binom{N}{i-1} A_i f \right] \\
 &= \frac{1}{N} \left[T_N f - \sum_{i=1}^{N-1} (-1)^{N-i} \binom{N}{i-1} A_i f \right] = A_N f
 \end{aligned}$$

which indicates that (31) is correct for $s=N$. This completes the proof of the theorem.

As an example we compute the third term of expansion (31). From the recurrence relations (26) and (27), we immediately obtain

$$A_2 = \frac{1}{2} (F_2 + F_2^2 + F_3) \tag{38}$$

From the identity (23), it is not difficult to get

$$\begin{aligned}
 F_2^2 &= \frac{1}{4} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^1}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j^2} - \frac{1}{2} \sum_{i,j,k=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \frac{\partial^1}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j \partial \lambda_k} \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \lambda_l \frac{\partial^1}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j \partial \lambda_k \partial \lambda_l} - \frac{3}{2} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^3 \partial \lambda_j} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{i=0}^m \lambda_i \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^3} - \frac{1}{2} \sum_{i=0}^m \lambda_i \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^3} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^2}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j}
 \end{aligned}$$

thus from (23), (24) and (38) we have

$$\begin{aligned}
 A_2 &= \frac{1}{6} \sum_{i=0}^m \lambda_i \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^3} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j} + \frac{1}{3} \sum_{i,j,k=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \frac{\partial^3}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j \partial \lambda_k} \\
 &+ \frac{1}{8} \sum_{i,j=0}^m \lambda_i \lambda_j \frac{\partial^1}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j^2} - \frac{1}{4} \sum_{i,j,k=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \frac{\partial^1}{\partial \lambda_i^2 \partial \lambda_j \partial \lambda_k} \\
 &+ \frac{1}{8} \sum_{i,j,k,l=0}^m \lambda_i \lambda_j \lambda_k \lambda_l \frac{\partial^1}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j \partial \lambda_k \partial \lambda_l}
 \end{aligned}$$

which just tallies with the conclusion (7). By theorem 2 and recurrence relations (26) and (27) we can also obtain.

Corollary 3 If $f \in C^6(\sigma)$, then

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n \{ n[(B_n f - f) - A_1 f] - A_2 f \} = A_3 f$$

where

$$A_3 = \frac{1}{6} F_2 + \frac{2}{3} F_2^2 + \frac{1}{6} F_2^3 + \frac{1}{6} F_3 F_2 + \frac{1}{3} F_2 F_3 + \frac{1}{2} F_3 + \frac{1}{3} F_4 \tag{39}$$

here F_2, F_3 and F_4 are defined by (23), (24) and (25).

4 The Higher Difference About the Degree of $B_n f$

For a sequence $g(n), n=1, 2, \dots$, we denote the higher difference of $g(n)$ by

$$\Delta_2^l g(n) := g(n), \Delta_1^l g(n) := g(n) - g(n+1), \Delta_0^l g(n) := \Delta_1^l (\Delta_1^{l-1} g(n))$$

It is not difficult to verify the following properties

$$\Delta_2^l (\Delta_1^k g(n)) = \Delta_1^k (\Delta_2^l g(n)) \tag{40}$$

$$\Delta_2^k g(n) = \sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} g(n+i) \tag{41}$$

$$\Delta_2^k (f(n)g(n)) = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} [\Delta_2^{k-i} f(n+i)] [\Delta_2^i g(n)] \tag{42}$$

Using the properties of difference, we can prove

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{l+k} \Delta_2^l \frac{1}{(n+c)^k} = \frac{(l+k-1)!}{(l-1)!}, k=0, 1, 2, \dots, l=1, 2, \dots \tag{43}$$

Where c is an arbitrary constant. Corollary 1 of theorem 1 tell us that if $f \in C^2(\sigma)$, then $\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \Delta_1^2 B_n f = F_2 f$. By the Stolz theorem we can also know that if $f \in C^2(\sigma)$ and the limit $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s+1} \Delta_1^s B_n f$ exists, then the limit must be $s! F_2 f$. This conclusion could be straight obtained from the expansion (31) and the identity (43) when $f \in C^{s+2}(\sigma)$. Actually, from theorem 1 we can prove.

Theorem 3 If $f \in C^{s+2}(\sigma)$, then

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s+1} \Delta_1^s B_n(f) = s! F_2 f$$

Proof Corollary 1 shows that theorem 3 is true for $s=1$. Suppose that

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{j+1} \Delta_1^j B_n(f) = j! F_2 f \tag{44}$$

holds for $f \in C^{j+1}(\sigma)$ and $j=1, 2, \dots, s$. Let $f \in C^{s+2}(\sigma)$. By theorem 1

$$B_n f - B_{n+1} f = \sum_{i=2}^{s+2} \frac{1}{n^i} B_{n+1}(F_i f) + \frac{o(1)}{n^{s+2}}$$

From the properties of difference and the above form, we have

$$\begin{aligned} \Delta_2^{s+1} B_n f &= \Delta_2^s (B_n f - B_{n+1} f) = \sum_{i=2}^{s+2} \Delta_2^s \left[\frac{1}{n^i} B_{n+1}(F_i f) \right] + \Delta_2^{s+1} \left(\frac{o(1)}{n^{s+2}} \right) \\ &= \sum_{i=2}^{s+2} \sum_{k=0}^s \binom{s}{k} \left[\Delta_2^{s-k} \frac{1}{(n+k)^i} \right] [\Delta_2^k B_{n+1}(F_i f)] + \frac{o(1)}{n^{s+2}} \end{aligned}$$

and it follows that

$$n^{s+2} \Delta_2^{s+1} B_n f = \sum_{i=2}^{s+2} \sum_{k=0}^s \binom{s}{k} \left[n^{s+2-k} \Delta_2^{s-k} \frac{1}{(n+k)^i} \right] [n^{k-i+2} \Delta_2^k B_{n+1}(F_i f)] + o(1) \tag{45}$$

From (43), it is obvious that

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s+2-k} \Delta_2^{s-k} \frac{1}{(n+k)^i} = \frac{(s+l-k-1)!}{(l-1)!} \tag{46}$$

Now we calculate the limit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s+2-k} \Delta_2^{s-k} B_{n+1}(A_i f)$$

by six cases

(i) For $k=s, l=s+2$, by (41)

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{s-l+2} \Delta_n^l B_{s+1}(Fif) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^s (-1)^i \binom{s}{i} B_{s+1+i}(Fif) = \sum_{i=0}^s (-1)^i \binom{s}{i} F_2 f = 0 \end{aligned}$$

(ii) For $k=s, l=s+1$, By (41) and theorem 1

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{s-l+2} \Delta_n^l B_{s+1}(Fif) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n \Delta_n^l \left[\sum_{i=0}^{s-1} (-1)^i \binom{s-1}{i} B_{s+1+i}(Fif) \right] \\ &= \sum_{i=0}^{s-1} (-1)^i \binom{s-1}{i} \lim_{n \rightarrow \infty} n [B_{s+1+i}(Fif) - B_{s+2+i}(Fif)] = 0 \end{aligned}$$

(iii) For $k=s, l \leq s$, from (40, (41) and our hypothesis

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} n^{s-l+2} \Delta_n^l B_{s+1}(Fif) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^{s-l+2} \Delta_n^{s+1-l} [\Delta_n^{l-1} B_{s+1}(Fif)] \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \Delta_n^{s-l+2} \Delta_n^{s+1-l} \left[\sum_{i=0}^{l-1} (-1)^i \binom{l-1}{i} B_{s+1+i}(Fif) \right] \\ &= \sum_{i=0}^{l-1} (-1)^i \binom{l-1}{i} \left[\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s-l+2} \Delta_n^{s+1-l} B_{s+1+i}(Fif) \right] \\ &= \sum_{i=0}^{l-1} (-1)^i \binom{l-1}{i} (s+1-l)! F_2(Fif) \\ &= 0 \end{aligned}$$

(iv) For $k < s, k+l-s-1 \geq 0, l \leq s+1$, because $Fif \in C^{s+2-l}(\sigma)$, we have

$$\Delta_n^{s+1-l} B_{s+1}(Fif) = \frac{1}{n^{s+2-l}} O(1)$$

according to our hypothesis, and it follows that

$$\Delta_n^l B_{s+1}(Fif) = \Delta_n^{s+1-l} [\Delta_n^{s+1-l} B_{s+1}(Fif)] = \frac{1}{n^{s+2-l}} O(1)$$

hence

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s-l+2} \Delta_n^l B_{s+1}(Fif) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{O(1)}{n^{s-l}} = 0$$

(v) For $k < s, k+l-s-1 \geq 0, l = s+2$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s-l+2} \Delta_n^l B_{s+1}(Fif) = 0$$

since $\Delta_n^l B_{s+1}(Fif)$ is bounded.

(vi) For $k < s, k+l-s-1 < 0$, because $Fif \in C^{s+2-l}(\sigma) \subset C^{s+1}(\sigma)$, we have

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s+1} \Delta_n^l B_{s+1}(Fif) = k! F_2(Fif), k > 0$$

according to our hypothesis, hence

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s-l+2} \Delta_n^l B_{s+1}(Fif) = \begin{cases} 0, & l > 2 \text{ or } k > 0, \\ F_2 f, & k = 0, l = 2. \end{cases}$$

Synthesizing (i) - (vi), we get

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s+2} \Delta_n^s (F_2 f) = \begin{cases} (F_2 f), & k=0, l=2 \\ 0, & k>0 \text{ or } l>2 \end{cases} \quad (47)$$

for $0 \leq k \leq s, 2 \leq l \leq s+2$. Thus from (45), (46) and (47), we obtain

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{s+2} \Delta_n^{s+1} B_n f = (s+1) F_2 f$$

which shows (44) is true for $j=s+1$ and $f \in C^{s+2}(\sigma)$. This completes the proof of the theorem.

The author is sincerely grateful to Professor Feng Yuyu for his directions.

References

- [1] Dahmen W and Micelli C A, *Acta Mathematicae Applicatae Sinica*, 6(1990), No. 1, 50-66.
- [2] Jian R Q and Wu Z C, *Acta Mathematica Sinica*, 34(1988), 510-522.
- [3] Feng Y Y and Kozak J, *Constructive Approximation*, 8(1992), 49-58.
- [4] Lorentz G G, *Bernstein Polynomials*, University of Toronto Press, 1953, 22-25.

单纯形上 Bernstein 多项式的渐近展开式 及关于阶的高阶差分

李 平

(数学系)

摘 要

给出了单纯形上两个相邻 Bernstein 多项式的差的一个估计式以及 Bernstein 多项式的一个渐近展开式并讨论了 Bernstein 多项式关于阶的高阶差分, 得到一个极限公式.

关键词: Bernstein 多项式, 单纯形, 渐近展开式, 差分

中图法分类号: O174.41

正态分布参数的经验 Bayes 检验

杨亚宁

(数学系)

摘 要

本文旨在研究正态分布参数 (μ, σ^2) 的线性组合的经验 Bayes 检验问题. 文中构造了经验 Bayes 判决准则, 证明了它具有渐近最优(a. o.)的性质, 并在适当的条件下得到了 $O(n^{-\frac{(k-1)\lambda}{2k+2}})$ 的收敛速度, 其中 $k \geq 2$ 为某个自然数, 而 $0 < \lambda < 2$.

关键词: 正态分布, 收敛速度, 经验 Bayes 判决

中图法分类号: O212.1

AMS Subject Classifications (1991): 62C12

1 引言

自从 Robbins^[1]提出经验 Bayes(EB)方法以来, 关于参数的 EB 检验问题已有了不少研究. Johns 和 Ryzin 考虑了一维离散指数族和连续指数族的单侧 EB 检验问题^[2,3]; 韦来生研究了上述分布族参数的双侧 EB 检验问题^[4,5]; 陶波讨论了正态分布参数 (μ, σ^2) 的 EB 估计问题, 并证明了渐近最优性^[6]; 张平则给出了其收敛速度^[7]. 但这些结论都未包含正态分布参数 (μ, σ^2) 的 EB 检验问题. 本文要讨论的是, 正态分布参数 (μ, σ^2) 的线性组合的 EB 检验的渐近最优性(a. o.), 并给出其收敛速度.

设 r. v. X 在给定参数 $\theta = (\mu, \sigma^2)'$ 时服从正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$, 其条件密度为

$$\bar{f}(x|\theta) = (\sqrt{2\pi}\sigma)^{-1} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}, \quad x \in R^1 \quad (1)$$

其中 $\theta \in \Theta = \{\theta = ((\mu, \sigma^2)'; \mu \in R^1, \sigma^2 > 0)\}$ 为参数空间, 若有样本 X_1, X_2, \dots, X_m . iid $\sim N(\mu, \sigma^2)$, $m \geq 2$, 令 $\bar{X} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m X_i$ 为样本均值, $S^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (X_i - \bar{X})^2$ 为样本方差, 则 \bar{X} 与 S^2 相互独

立, 而 $\bar{X} \sim N(\mu, \frac{1}{m}\sigma^2)$, $mS^2/\sigma^2 \sim \chi_{m-1}^2$. 因 $(\bar{X}, S^2)'$ 是 $(\mu, \sigma^2)'$ 的充分统计量, 故可用 $Y = (\bar{X}, S^2)'$ 代替 $X = (X_1, \dots, X_m)'$ 作统计推断. 记 \mathscr{Y} 为 Y 的样本空间, $Y = (\bar{X}, S^2)'$ 的条件密度为

$$f(y|\theta) = K_0 \sigma^{-m} s^{m-3} \exp\left\{-\frac{m}{2\sigma^2}[(\bar{x} - \mu)^2 + s^2]\right\} d\bar{x} ds^2 \quad (2)$$

这里 $y = (\bar{x}, s^2)' \in \mathscr{Y}$, K_0 为正则化常数. 假设 θ 服从先验分布 $G(\cdot)$, 则 Y 的边缘密度为 $f(y) = \int_{\Theta} f(y|\theta) dG(\theta)$. 考虑下述检验问题

$$H_0: a'\theta \leq c \leftrightarrow H_1: a'\theta > c$$

这里 $a = (a_1, a_2)$ 是常向量, c 为常数, 该检验问题有两个重要的特款, 即常见的 $H'_0: \mu \leq \mu_0 \leftrightarrow H'_1: \mu > \mu_0$ 和 $H''_0: \sigma^2 \leq \sigma_0^2 \leftrightarrow H''_1: \sigma^2 > \sigma_0^2$, 其中 μ_0, σ_0^2 分别是给定的常数.

取损失函数为

$$L(\theta, i) = b_0 \left(\frac{a'\theta - c}{\sigma^2} \right) (1 - i) 1_{(a'\theta > c)} + b_0 \left(\frac{c - a'\theta}{\sigma^2} \right) i 1_{(a'\theta \leq c)} \quad (3)$$

其中 $i=0, 1$. i 表示接受 H_i , b_0 为给定的常数. 若 $\delta(y) = P(\text{接受 } H_0 | y)$ 为一个随机化判决函数, 那么其 Bayes 风险为

$$\begin{aligned} R(\delta(y), G) &= b_0 \int_{\mathscr{Y}} \int_{\Theta} [L(\theta, 0)\delta(y) + L(\theta, 1)(1 - \delta(y))] f(y|\theta) dG(\theta) dy \\ &= C_0 + b_0 \int_{\mathscr{Y}} \delta(y) a(y) dy \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $a(y) = \int_{\Theta} [a'\theta - c]/\sigma^2 f(y|\theta) dG(\theta)$, $C_0 = \int_{\Theta} L(\theta, 1) dG(\theta)$

令

$$g(y|\theta) = f(y|\theta)/s^{m-3} = K_0 \sigma^{-m} \exp\left\{-\frac{m}{2\sigma^2}[(\bar{x} - \mu)^2 + s^2]\right\} \quad (5)$$

$$g(y) = \int_{\Theta} g(y|\theta) dG(\theta) = K_0 \int_{\Theta} \sigma^{-m} \exp\left\{-\frac{m}{2\sigma^2}[(\bar{x} - \mu)^2 + s^2]\right\} dG(\theta) \quad (6)$$

如果 $g(y)$ 关于 \bar{x}, s^2 的一阶偏导数存在, 记 $g_1(y) = \frac{\partial g(y)}{\partial \bar{x}}$, $g_2(y) = \frac{\partial g(y)}{\partial (s^2)}$. 容易知道

$$g_1(y) = -m\bar{x} \int_{\Theta} \sigma^{-2} g(y|\theta) dG(\theta) + m \int_{\Theta} \sigma^{-2} \mu g(y|\theta) dG(\theta) \quad (7)$$

$$g_2(y) = -\frac{m}{2} \int_{\Theta} \sigma^{-2} g(y|\theta) dG(\theta) \quad (8)$$

所以 $a(y)$ 可以表示为

$$\begin{aligned} a(y) &= \int_{\Theta} \left(\frac{a_1 \mu + a_2 \sigma^2}{\sigma^2} \right) g(y|\theta) s^{m-3} dG(\theta) \\ &= s^{m-3} \left[\frac{a_1}{m} g_1(y) + v(y) g_2(y) + a_2 g(y) \right] \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $v(y) = 2(c - a_1 \bar{x})/m$ (10)

从(4)式, 我们得到 $H_0 \leftrightarrow H_1$ 的 Bayes 判决函数

$$\delta_0(y) = \begin{cases} 1 & \text{若 } a(y) \leq 0 \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \quad (11)$$

其 Bayes 风险就是

$$R_0 \triangleq \inf_{\delta(y), G} R(\delta(y), G) = R(\delta_0(y), G) = b_0 \int \alpha(y) \delta_0(y) dy + C_0 \quad (12)$$

在先验分布 $G(\cdot)$ 未知的情况下, 我们采取 EB 方法. 设 $(X_{11}, \dots, X_{1m}), \dots, (X_{n1}, \dots, X_{nm})$ 是历史样本, $X = (X_1, \dots, X_m)$ 是当前样本, 它们相互独立, 而且 $X_{ij} \sim N(\mu_i, \sigma_i^2), 1 \leq j \leq m, 1 \leq i \leq n$, 而 $X_k \sim N(\mu, \sigma^2), 1 \leq k \leq m$. 所有的 $X_{ij}, X_k, 1 \leq j \leq m, 1 \leq i \leq n, 1 \leq k \leq m$ 相互独立. 在 EB 判决问题中, $(\mu_1, \sigma_1^2), \dots, (\mu_n^2, \sigma_n^2), (\mu, \sigma^2)$ 为 iid 的, 具有共同的分布 $G(\cdot)$. 记 $\bar{X}_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m X_{ij}, S_i^2 = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (X_{ij} - \bar{X}_i)^2$, 则 $Y_i = (\bar{X}_i, S_i^2), i = 1, \dots, n$ 和 $Y = (\bar{X}, S^2)$ 皆为充分统计量, 并且是 iid 的服从共同的边缘密度 $f(y)$. 下面我们将用 $Y_i, i = 1, \dots, n$ 和 Y 代替 $(X_{i1}, \dots, X_{im}), i = 1, \dots, n$ 和 $X = (X_1, \dots, X_m)$, 并称 $Y_i, i = 1, \dots, n$ 为历史样本, Y 为当前样本.

在 EB 判决问题中, 若 EB 判决函数 δ_n^* 的“全面”Bayes 风险 $R_n \triangleq R(\delta_n^*, G)$ 满足 $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = R_0$, 则称 δ_n^* 为渐近最优(a. o.)的 EB 判决函数; 如果 $R_n - R_0 = O(n^{-q}), q > 0$, 则称 δ_n^* 的收敛速度为 q .

本文将定义 $g(y)$ 和 $g_i(y), i = 1, 2$ 的核估计, 进而构造出 $H_0 \leftarrow H_1$ 的一个 EB 判决函数, 并在一定条件下证明它具有 a. o. 性质, 而且其收敛速度为 $q = \frac{k-1}{2k+2}$. 在下文中, c_1, c_2, c, \dots 等表示与 n 无关的常数, 即使在同一式中同一个这些符号也可以表示不同的常数值.

2 EB 判决函数的构造

设有界函数 $K_{r_i}(u_i), r_i = 0, 1, i = 1, 2$, 满足

$$\int_0^b u_i^{l_i} K_{r_i}(u_i) du_i = \begin{cases} 1 & \text{若 } l_i = r_i \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \quad r_i = 0, 1; i = 1, 2$$

并且在 $[0, b]$ 之外为 0 (b 为正的常数). 取 $K_{r_1, r_2}(u) = K_{r_1}(u_1) K_{r_2}(u_2), u = (u_1, u_2)$, 则 $K_{r_1, r_2}(u)$ 在 $[0, b]^2$ 之外为 0 并且存在常数 $M > 0$, 使 $|K_{r_1, r_2}(u)| < M$. 易知

$$\int_0^b \int_0^b K_{r_1, r_2}(u) u_1^{l_1} u_2^{l_2} du_1 du_2 = \begin{cases} 1 & \text{若 } l_i = r_i, i = 1, 2 \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \quad (13)$$

其中 l_i 为 0 或 1. 如果 $g_1(y), g_2(y)$ 存在有限, 则以

$$\begin{aligned} g_n(y) &= (nh_n^2)^{-1} \sum_{i=1}^n K_{00} \left(\frac{Y_i - y}{h_n} \right) S_i^{-(n-3)} \\ g_{n1}(y) &= (nh_n^2)^{-1} \sum_{i=1}^n K_{10} \left(\frac{Y_i - y}{h_n} \right) S_i^{-(n-3)} \\ g_{n2}(y) &= (nh_n^2)^{-1} \sum_{i=1}^n K_{01} \left(\frac{Y_i - y}{h_n} \right) S_i^{-(n-3)} \end{aligned} \quad (14)$$

分别作为 $g(y), g_1(y)$ 和 $g_2(y)$ 的核估计, 其中 $h_n > 0, \lim_{n \rightarrow \infty} h_n = 0$, 而以 $\alpha_n(y)$ 作为 $\alpha(y)$ 的估计, $\alpha_n(y)$ 定义如下

$$\alpha_n(y) = s^{n-3} \left[\frac{a_1}{m} g_{n1}(y) + v(y) g_{n2}(y) + a_2 g_n(y) \right] \quad (15)$$

定义 EB 判决函数为

$$\delta_n(y) = \begin{cases} 1 & \text{若 } \alpha_n(y) \leq 0 \\ 0 & \text{否则} \end{cases} \quad (16)$$

此时, $\delta_n(y)$ 的“全面”Bayes 风险

$$R_n \triangleq R_n(\delta_n, G) = b_0 E \int \delta_n(y) \alpha(y) d\gamma + C_0 \quad (17)$$

其中, E 表示对 $Y_i, i=1, 2, \dots, n$ 取均值.

3 $\delta_n(y)$ 的 a. o. 性

引理 1 若 $\theta = (\mu, \sigma^2)'$ 的先验分布 $G(\theta) \in \mathcal{F}_k$

$$\mathcal{F}_k = \left\{ G : E_0 \sigma^{-(n+2k)} = \int_{\Theta} \sigma^{-(2k+n)} dG(\theta) < \infty \right\}$$

这里 k 为正整数, 则 $g^{(k)}(k_1, k_2; y) \triangleq \frac{\partial^k}{\partial x^{k_1} \partial (s^2)^{k_2}}$ 存在有限而且连续, 且存在只与 k 有关与 G, y 无关的常数 $\alpha > 0$, 致使

$$|g^{(k)}(k_1, k_2; y)| < \alpha \quad (18)$$

其中 k_1, k_2 为非负整数, $k_1 + k_2 = k$.

证明 记 Hermit 函数 $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} (e^{-x^2/2})^{(n)} = \sum_{j=0}^n \tilde{a}_j x^j$, 其中 $\tilde{a}_j, 0 \leq j \leq n$ 是只与 n 有关的常数. 对 $k_1 \geq 0, k_2 \geq 0, k_1 + k_2 = k$, 我们有

$$\begin{aligned} & \int \frac{\partial^k}{\partial x^{k_1} \partial (s^2)^{k_2}} g(y|\theta) dG(\theta) \\ &= K_0 \int \sigma^{-n} \frac{d^{k_1}}{dx^{k_1}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{m}}{\sigma} (\bar{x} - \mu)\right)^2\right] \frac{d^{k_2}}{d(s^2)^{k_2}} \exp\left(-\frac{ms^2}{2\sigma^2}\right) dG(\theta) \\ &= K_0 \int \sigma^{-n} \exp\left[-\frac{m}{2\sigma^2} (\bar{x} - \mu)^2\right] \left(-\frac{\sqrt{m}}{\sigma}\right)^{k_1} \left(-\frac{m}{2\sigma^2}\right)^{k_2} H_{k_1}\left(\frac{\sqrt{m}}{\sigma} (\bar{x} - \mu)\right) dG(\theta) \\ &= K_0 \int \sigma^{-(n+k_1+2k_2)} 2^{-k_2} (-m)^{k_2} 2^{\frac{k_1}{2}} \left[\sum_{j=0}^{k_1} \tilde{a}_j \left(\frac{\sqrt{m}}{\sigma} (\bar{x} - \mu)\right)^j\right] \\ & \quad \cdot \exp\left[-\frac{m}{2\sigma^2} (\bar{x} - \mu)^2 - \frac{m}{2\sigma^2} s^2\right] dG(\theta) \end{aligned}$$

因对 \forall 自然数 $j \leq k$, $\left|\left(\frac{\sqrt{m}}{\sigma} (\bar{x} - \mu)\right)^j \exp\left[-\frac{m}{2\sigma^2} (\bar{x} - \mu)^2\right]\right| < \alpha_1$, (这里, α_1 为仅与 k 有关的常数). 又因 $G \in \mathcal{F}_k$, 所以 $\int \sigma^{-n-k_1} dG(\theta) \leq 1 + \int \sigma^{-n-2k_2} dG(\theta) < \infty$, 因此存在仅与 k 有关的常数 $\alpha > 0$, 使得

$$\int \left| \frac{\partial^k}{\partial x^{k_1} \partial (s^2)^{k_2}} g(y|\theta) \right| dG(\theta) < \alpha$$

由此容易知道 $g^{(k)}(k_1, k_2; y)$ 存在、有限、连续并满足(18)式, 证毕.

引理 2 R_0 和 R_n 由(11)、(17)定义, 则

$$0 \leq R_n - R_0 \leq \int |\alpha(y)| P\{|\alpha_n(y) - \alpha(y)| > |\alpha(y)|\} dy$$

证明见[3]引理 1.

引理 3 假设 $G \in \mathcal{F}_1, g_n(y), g_{ni}(y) \quad i=1, 2$ 由 (14) 定义, 如果 $\lim_{n \rightarrow \infty} h_n = 0, \lim_{n \rightarrow \infty} nh_n^2 = +\infty$, 则对任何固定的 y ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E |g_{ni}(y) - g_i(y)|^2 = 0 \quad i = 1, 2$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E |g_n(y) - g(y)|^2 = 0$$

证明 只证 $\lim_{n \rightarrow \infty} E |g_{n1}(y) - g_1(y)|^2 = 0$, 其余的证明完全类似. 由 $G \in \mathcal{F}_1$ 及引理 1 知 $g_1(y)$ 存在有限而且连续, 容易知道 $E |g_{n1}(y) - g_1(y)|^2 \leq 2[\text{Var}g_{n1}(y) + |Eg_{n1}(y) - g_1(y)|^2] \triangleq 2(I_1 + I_2)$, 若记 $u = (u_1, u_2), du = du_1 du_2$, 由 $Y_i, i=1, \dots, n$ 独立性和 g 的有界性知对固定的 y

$$\begin{aligned} I_1 &= \text{Var}g_{n1}(y) = (nh_n^2)^{-2} \sum_{i=1}^n \text{Var} \left[K_{10} \left(\frac{Y_i - y}{h_n} \right) S_i^{-(n-3)} \right] \\ &\leq (nh_n^2)^{-1} \int_{\mathcal{D}} K_{10}^2 \left(\frac{y_1 - y}{h_n} \right) f(y_1) s^{-2(n-3)} dy_1 \\ &= (nh_n^2)^{-1} \int_{[0, b]^2} K_{10}^2(u) g(y + uh_n) (s^2 + u_1 h_n)^{-\frac{1}{2}(n-3)} du \\ &\leq c_1 (nh_n^2)^{-1} \int_{[0, b]^2} g(y + uh_n) s^{-(n-3)} du \\ &\leq c_2 s^{-(n-3)} (nh_n^2)^{-1} \end{aligned}$$

故由

$$\lim_{n \rightarrow \infty} nh_n^2 = +\infty$$

知

$$\lim_{n \rightarrow \infty} I_1 = 0 \tag{19}$$

另一方面, 由中值定理知存在 $0 < \xi_1, \xi_2 < 1$, 使得 $g(y + uh_n) = g(y) + g_1(y + \xi_1 uh_n) u_1 h_n + g_2(y + \xi_2 uh_n) u_2 h_n$, 所以由

$$Eg_{n1}(y) = h_n^{-3} \int K_{10} \left(\frac{y_1 - y}{h_n} \right) s^{-(n-3)} f(y_1) dy_1 = h_n^{-1} \int_{[0, b]^2} K_{10}(u) g(y + uh_n) du \tag{20}$$

以及 $|K_{10}(u)| < M$ 知

$$\begin{aligned} I_2 &= |Eg_{n1}(y) - g_1(y)| \leq \left| \int_{[0, b]^2} K_{10}(u) [g_1(y + \xi_1 uh_n) - g_1(y)] u_1 du \right| \\ &\quad + \left| \int_{[0, b]^2} g_2(y + \xi_2 uh_n) u_2 K_{10}(u) du \right| \\ &\leq Mb \int_{[0, b]^2} |g_1(y + \xi_1 uh_n) - g_1(y)| du + \left| \int_{[0, b]^2} g_2(y + \xi_2 uh_n) u_2 K_{10}(u) du \right| \end{aligned}$$

因 g_1 连续, 对 $\forall u \in [0, b]^2, \lim_{n \rightarrow \infty} \xi_1 uh_n = 0$, 所以 $\int_{[0, b]^2} |g_1(y + \xi_1 uh_n) - g_1(y)| du \rightarrow 0 (n \rightarrow \infty)$. 再

由 $\int_{[0, b]^2} K_{10}(u) u_2 du = 0$ 和 g_2 的连续性, 得

$$\int_{[0, b]^2} g_2(y + \xi_2 uh_n) u_2 K_{10}(u) du \rightarrow 0 (n \rightarrow \infty).$$

因此 $\lim_{n \rightarrow \infty} I_2 = 0$, 结合 (19) 立得 $\lim_{n \rightarrow \infty} E |g_{n1}(y) - g_1(y)|^2 = 0$. 证毕.

定理 1 EB 判决函数 $\delta_n(y)$ 定义如 (16), $g_n(y), g_{ni}(y), i=1, 2$ 由 (14) 定义, 如果 $m \geq 2$,

$G \in \mathcal{F}_1$ 且 $E_0 |\mu| \sigma^{-2} = \int_{\Theta} |\mu| \sigma^{-2} dG(\theta) < \infty$, 则当 $h_n \rightarrow 0, nh_n^2 \rightarrow \infty (n \rightarrow \infty)$ 时, 有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = R_0$$

证明 对 $u = (u_1, u_2)$ 记 $\|u\| = (u_1^2 + u_2^2)^{\frac{1}{2}}$. 由 $G \in \mathcal{F}_1$ 知 $g_1(y), g_2(y)$ 存在有限, 由引理 2 有

$$R_n - R_0 \leq b_0 \int |a(y)| P\{\alpha_n(y) - a(y) > |a(y)|\} dy \triangleq b_0 \int V_n(y) dy \quad (21)$$

显然, $|V_n(y)| \leq |a(y)|$. 由于 $a(y) = \int_{\Theta} (a'\theta - c) \sigma^{-2} f(y|\theta) dG(\theta)$, 故

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}} |a(y)| dy &\leq \int_{\mathcal{S}} \int_{\Theta} |a'\theta - c| \sigma^{-2} f(y|\theta) dG(\theta) dy \\ &\leq \int_{\mathcal{S}} \int_{\Theta} (\|a\| \|\theta\| + c) \sigma^{-2} f(y|\theta) dG(\theta) dy \\ &\leq \|a\| \int_{\mathcal{S}} \int_{\Theta} (|\mu| + \sigma^2) \sigma^{-2} f(y|\theta) dG(\theta) dy + c \int_{\Theta} \int_{\mathcal{S}} f(y|\theta) \sigma^{-2} dy dG(\theta) \\ &= \|a\| E_0 |\mu| \sigma^{-2} + \|a\| + c E_0 \sigma^{-2} < \infty \end{aligned}$$

由控制收敛定理及 Markov 不等式和 (9)、(15)

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{S}} V_n(y) dy &= \int_{\mathcal{S}} \lim_{n \rightarrow \infty} V_n(y) dy \\ &\leq \int_{\mathcal{S}} \lim_{n \rightarrow \infty} E |\alpha_n(y) - a(y)| dy \\ &\leq \int_{\mathcal{S}} \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \frac{|a_1|}{m} E |g_{n1}(y) - g_1(y)| + |v(y)| E |g_{n2}(y) - g_2(y)| \right. \\ &\quad \left. + |a_2| E |g_n(y) - g(y)| \right\} s^{n-2} dy \end{aligned}$$

由引理 3 即得 $\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{S}} V_n(y) dy = 0$, 结合 (21) 式, 立刻得到 $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = R_0$. 定理证毕

4 $\delta_n(y)$ 的收敛速度

以下对任何 $\varepsilon > 0$, 记 $g_\varepsilon(y) = \sup_{\|z\| \leq \varepsilon} g(y+z)$, 这里 $z = (z_1, z_2) \geq 0, \|z\| = (z_1^2 + z_2^2)^{\frac{1}{2}}, y = (\bar{x}, s^2), y+z \triangleq (\bar{x}+z_1, s^2+z_2)$, 对任何满足 $k_1+k_2=k$ 的非负整数的 k_1, k_2 和自然数 k , 记 $g_\varepsilon^{(k)}(k_1, k_2; y) = \sup_{\substack{\|z\| \leq \varepsilon \\ z_1+z_2=k}} |g^{(k)}(k_1, k_2; y+z)|$ 及 $g_\varepsilon^{(k)}(y) = \sum_{k_1+k_2=k} g_\varepsilon^{(k)}(k_1, k_2; y)$.

引理 4 $k \geq 2$ 为给定的整数, 若记 $M_\varepsilon(y) = (g_\varepsilon^{(k)}(y))^\lambda + s^{-\frac{\lambda}{2}(k-3)} g_\varepsilon^{(k/2)}(y)$ 这里 $0 < \lambda < 2$, 则对 $\forall \varepsilon > 0$, 当 $G \in \mathcal{F}_1$ 和 $h_n = n^{-\frac{1}{2k+2}}$ 时,

$$E |g_{n1}(y) - g_1(y)|^\lambda = O\left(n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+2}}\right) M_\varepsilon(y) \quad i = 1, 2$$

$$E |g_n(y) - g(y)|^\lambda = O\left(n^{-\frac{\lambda k}{2k+2}}\right) M_\varepsilon(y)$$

证明 我们只证第一式中 $i=1$ 的情形, 其余的证明完全类似, 因 $0 < \lambda < 2$, 故

$$E |g_{n1}(y) - g_1(y)|^\lambda \leq c [\text{Varg}_{n1}(y)]^{\frac{\lambda}{2}} + c |E g_{n1}(y) - g_1(y)|^\lambda \quad (22)$$

对 $\forall \varepsilon > 0$, 当 n 充分大时, 类似于引理 3 的证明可得

$$\text{Varg}_{n1}(y) \leq c_1 (nh_n^2)^{-1} \int_{[0, \varepsilon]^2} g(y + uh_n) s^{-(k-3)} du$$

$$\leq c_1 (nh_n^2)^{-1} s^{-(n-3)} g_e(y) \tag{23}$$

再由 (20) 和 Taylor 展开公式以及引理 1 知

$$\begin{aligned} |Eg_{n1}(y) - g_1(y)| &= |h_n^{-1} \int K_{10}(u) g(y + uh_n) du - g_1(y)| \\ &= \left| h_n^{-1} \int K_{10}(u) \left[g(y) + \sum_{i=1}^{k-1} \frac{1}{i!} \sum_{i_1+\dots+i_{i-1}=i} g^{(i)}(i_1, i_2; y) u_{i_1}^1 u_{i_2}^2 h_n^i \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{i_1+i_2=i} \frac{1}{k!} g^{(k)}(k_1, k_2; \bar{y}) u_{i_1}^1 u_{i_2}^2 h_n^k \right] du - g_1(y) \right| \\ &= \left| \sum_{i_1+i_2=i} \frac{1}{k!} h_n^{k-i} \int g^{(k)}(k_1, k_2; \bar{y}) K_{10}(u) u_{i_1}^1 u_{i_2}^2 du \right| \\ &\leq c_2 h_n^{k-1} g_e^{(k)}(y) \end{aligned} \tag{24}$$

其中利用了 (13) 式, 而 $\bar{y} = y + \zeta h_n u, 0 \leq \zeta \leq 1$.

由 (22), (23), (24) 即知当 $h_n = n^{-\frac{1}{2k+2}}$ 时, $E|g_{n1}(y) - g_1(y)|^2 \leq O\left(n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+2}}\right) [(g_e^{(k)}(y))^2 + s^{-\frac{\lambda}{2}(n-3)} g_e^{2/2}(y)] = M_e(y) O\left(n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+2}}\right)$. 证毕.

定理 2 若 $\delta_n(y)$ 由 (16) 定义, 先验分布 $G \in \mathcal{F}_k, k \geq 2$ 为自然数, 如果对 $0 < \lambda < 2$ 有

$$\int_{\mathcal{Y}} |\bar{x}|^{\lambda} |\alpha(y)|^{1-\lambda} [f_e^{2/2}(y) + (f_e^{(k)}(y))^2] dy < \infty, \quad i = 0, 1$$

其中 $f_e(y) = s^{n-3} g_e(y), f_e^{(k)}(y) = s^{n-3} g_e^{(k)}(y)$ 则

$$R_n - R_0 = R(\delta_n, G) - R_0 = O\left(n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+2}}\right)$$

证明 由引理 2 和 Markov 不等式

$$\begin{aligned} R_n - R_0 &\leq \int_{\mathcal{Y}} |\alpha(y)| P\{| \alpha_n(y) - \alpha(y) | > |\alpha(y)|\} dy \\ &= \int_{\mathcal{Y}} |\alpha(y)|^{1-\lambda} E|\alpha_n(y) - \alpha(y)|^{\lambda} dy \end{aligned} \tag{25}$$

从 (9), (25) 知

$$\begin{aligned} E|\alpha_n(y) - \alpha(y)|^{\lambda} &\leq c s^{\lambda(n-3)} \{E|g_{n1}(y) - g_1(y)|^{\lambda} \\ &\quad + |v(y)|^{\lambda} E|g_{n2}(y) - g_2(y)|^{\lambda} + E|g_n(y) - g(y)|^{\lambda}\} \end{aligned} \tag{26}$$

所以由 (25), (26) 和引理 4 得 (记 $q = \lambda(k-1)/(2k+2)$)

$$R_n - R_0 \leq c \int_{\mathcal{Y}} |\alpha(y)|^{1-\lambda} s^{\lambda(n-3)} \{2M_e(y) + |v(y)|^{\lambda} M_e(y)\} dy \cdot O(n^{-q})$$

再由 (10) 和 $s^{\lambda(n-3)} M_e(y) = f_e^{2/2}(y) + (f_e^{(k)}(y))^2$ 及条件得

$$\begin{aligned} R_n - R_0 &\leq c_1 \sum_{i=0}^1 \int_{\mathcal{Y}} |\bar{x}|^{\lambda} |\alpha(y)|^{1-\lambda} [f_e^{2/2}(y) + (f_e^{(k)}(y))^2] dy \cdot O(n^{-q}) \\ &= O(n^{-q}), \quad q = \frac{\lambda(k-1)}{2k+2} \end{aligned}$$

定理证毕.

值得注意的是, 当先验分布具有某种特定的参数形式时, 定理 2 的条件往往转化成对先验分布附加若干矩的条件. 如果 λ 任意接近于 2, k 可以充分大, 那么上述收敛速度可以任意接近于 $O(n^{-1})$.

通过对先验分布的矩附加若干限制, 获得 $\delta_n(y)$ 的收敛速度, 可以看到在某些情形, 这个收

敛速度可以任意接近于 $O(n^{-\frac{1}{2}})$.

引理 5 同前 $y = (\bar{x}, s^2)'$, $\theta = (\mu, \sigma^2)$, 对 $\forall \alpha > 0$ 有

$$\int_{\mathcal{O}} \|y\|^\alpha f(y|\theta) dy \leq c(1 + \|\theta\|^\alpha)$$

证明 此处略去.

定理 3 设自然数 $m \geq 3$, $\delta_n(y)$ 定义如 (16). 如果对某个自然数 $k \geq 2$, $G \in \mathcal{F}_k$, 并且存在 $\eta > 1$ 使得

$$E_0 \sigma^{-2} \|\theta\|^\eta < \infty \tag{27}$$

则对任何 $0 < \lambda < \frac{\eta-1}{\eta+2}$

$$R_n - R_0 \leq O\left(n^{-\frac{\lambda(\eta-1)}{2\lambda+2}}\right) \tag{28}$$

若进一步先验分布还满足

$$E_0 |\mu| \sigma^{-2k-3} < \infty, E_0 |\mu|^2 \sigma^{-3} < \infty \tag{29}$$

则对任何 $0 < \lambda < \frac{\eta-1}{\eta+1}$, (28) 成立.

证明 a) 首先假设 (21) 成立, 并且 $G \in \mathcal{F}_k$.

注意到对 $\forall j \leq k$, $\left[\frac{\sqrt{m}}{\sigma}(\bar{x} - \mu)\right]^j \exp\left[-\frac{m}{2\sigma^2}(\bar{x} - \mu)^2\right] < c$ 以及 $s^{m-3} \exp\left(-\frac{m}{2\sigma^2}s^2\right) < c\sigma^{m-3}$, 这里常数 c 仅与 m, K 有关而与 $y = (\bar{x}, s^2)$ 无关. 所以对 $z \geq 0, \|z\| \leq \varepsilon$ 有

$$\begin{aligned} s^{m-3} g(y+z) &= \int_{\mathcal{O}} K_0 \sigma^{-m} s^{m-3} \exp\left[-\frac{m}{2\sigma^2}(\bar{x} + z_1 - \mu)^2 - \frac{m}{2\sigma^2}(s^2 + z_2)\right] dG(\theta) \\ &\leq K_0 \int_{\mathcal{O}} \sigma^{-m} s^{m-3} \exp\left(-\frac{m}{2\sigma^2}s^2\right) dG(\theta) \\ &\leq K_0 c E_0 \sigma^{-3} < \infty \end{aligned}$$

同样因为 $m \geq 3$ 和 $G \in \mathcal{F}_k$

$$\begin{aligned} s^{m-3} g^{(k)}(k_1, k_2; y+z) &= c_0 \int_{\mathcal{O}} \sigma^{-m-k_1-k_2} \left[\sum_{j=0}^{k_1} a_j \left(\frac{\sqrt{m}}{\sigma}(\bar{x} + z_1 - \mu)\right)^j \right] \\ &\quad \cdot \exp\left[-\frac{m}{2\sigma^2}(\bar{x} + z_1 - \mu)^2\right] s^{m-3} \exp\left[-\frac{m}{2\sigma^2}(s^2 + z_2)\right] dG(\theta) \\ &\leq c \int_{\mathcal{O}} \sigma^{-k_1-k_2-3} \left(\frac{s}{\sigma}\right)^{m-3} \exp\left(-\frac{m}{2\sigma^2}s^2\right) dG(\theta) \\ &\leq c \int_{\mathcal{O}} \sigma^{-k_1-k_2-3} dG(\theta) \\ &\leq c(1 + E_0 \sigma^{-2k-3}) \leq c(1 + E_0 \sigma^{-2k-n}) \end{aligned}$$

所以 $f_n(y) < c_1 < \infty, f_n^{(k)}(y) = \sum_{k_1+k_2=k} \sup_{\|z\| < \varepsilon} |g^{(k)}(k_1, k_2; y+z)| < c_2 < \infty$. 因此为了验证定理 2 的条件成立, 仅需证明

$$\int |\bar{x}|^\mu |\alpha(y)|^{1-\lambda} dy < \infty \quad i = 0, 1 \tag{30}$$

$i=1$ 时, 对 $\forall 0 < \lambda < \frac{\eta-1}{\eta+2}$, 取 $\zeta = \frac{(1-\lambda)(\eta-1)}{\lambda} - 3$. 显然 $\zeta > 0$, 记 $\mathcal{O}' = \mathcal{O} \cap \{\|y\| > 1\}$, 则由

Hölder 不等式得

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{D}_\sigma} |\bar{x}|^\lambda |\alpha(y)|^{1-\lambda} dy \\ & \leq \int_{\mathcal{D}_\sigma} |\alpha(y)| \|y\| \frac{\lambda}{1-\lambda} (3+\epsilon) |1-\lambda| (\|y\|^{-(2+\epsilon)})^\lambda dy \\ & \leq \left\{ \int_{\mathcal{D}_\sigma} |\alpha(y)| \cdot \|y\| \frac{\lambda}{1-\lambda} (3+\epsilon) dy \right\}^{1-\lambda} \cdot \left\{ \int_{\mathcal{D}_\sigma} \|y\|^{-(2+\epsilon)} dy \right\}^\lambda \\ & \triangleq I_1^{1-\lambda} \cdot I_2^\lambda \end{aligned}$$

显然 $I_2 < \infty$, 而由引理 5 及条件(27)知

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{\mathcal{D}_\sigma} |\alpha(y)| \|y\|^\eta dy \\ &\leq \int_{\mathcal{D}_\sigma} \int_{\mathcal{D}} \sigma^{-2} |a'\theta - c| f(y|\theta) \|y\|^\eta dG(\theta) dy \\ &\leq c \int_{\mathcal{D}} \sigma^{-2} [\|a\| \cdot \|\theta\| + |c|] (1 + \|\theta\|^\eta) dG(\theta) \\ &\leq \bar{c} \int_{\mathcal{D}} \sigma^{-2} (1 + \|\theta\|^\eta) dG(\theta) \\ &= \bar{c} (E_0 \sigma^{-2} + E_0 \sigma^{-2} \|\theta\|^\eta) \end{aligned}$$

其中利用了对 $\eta > 1$ 有 $1 + \|\theta\| + \|\theta\|^\eta \leq c_1(1 + \|\theta\|^\eta)$. 所以 $\int_{\mathcal{D}_\sigma} |\bar{x}|^\lambda |\alpha(y)|^{1-\lambda} dy < \infty$, 另一方面显然有 $\int_{\mathcal{D}_\sigma \cap \{\|\cdot\| \leq 1\}} |\bar{x}|^\lambda |\alpha(y)|^{1-\lambda} dy = \int_{\mathcal{D}_\sigma \cap \{\|\cdot\| \leq 1\}} |\bar{x}|^\lambda |\alpha(y)|^{1-\lambda} dy < \infty$, 故 $i=1$ 时, (30) 成立.

$i=0$ 时, 取 $\eta' = \frac{2}{3}\eta + \frac{1}{3}$, 则 $1 < \eta' < \eta$, 故 $E_0 \sigma^{-2} \|\theta\|^\eta \leq E_0 \sigma^{-2} + E_0 \sigma^{-2} \|\theta\|^\eta < \infty$,

将上述 $i=1$ 的证明过程中的 η 以 η' 替代, 对 $\forall 0 < \lambda < \frac{\eta' - 1}{\eta' + 1} = \frac{\eta - 1}{\eta + 2}$, 取 $\xi' = \frac{(1-\lambda)(\eta' - 1)}{\lambda} - 2$ 则有

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{D}_\sigma} |\alpha(y)|^{1-\lambda} dy \\ &= \int_{\mathcal{D}_\sigma} |\alpha(y)| \cdot \|y\| \frac{\lambda}{1-\lambda} (2+\xi') |1-\lambda| (\|y\|^{-(2+\xi')})^\lambda dy \\ &\leq \left\{ \int_{\mathcal{D}_\sigma} |\alpha(y)| \cdot \|y\|^\eta dy \right\}^{1-\lambda} \cdot \left\{ \int_{\mathcal{D}_\sigma} \|y\|^{-(2+\xi')} dy \right\}^\lambda \end{aligned}$$

其余的证明与 $i=1$ 时完全相同(只须将 η 换成 η'), 故(30)对 $i=0$ 成立. 因而结论成立.

b) 如果(27), (29)成立, 类似于 a) 可得

$$\begin{aligned} |\bar{x}|^2 s^{\eta-3} g_c(y) &\leq c \cdot \sup_{\substack{z_1 \geq 0 \\ \|z\| \leq c}} \{ (|\bar{x} + z_1 - \mu|^2 + |\mu|^2 + 1) s^{\eta-3} \\ &\cdot \int_{\mathcal{D}} K_0 \sigma^{-\eta} \exp\left\{-\frac{m}{2\sigma^2} [(\bar{x} - \mu + z_1)^2 + s^2 + z_2]\right\} dG(\theta) \} \\ &\leq c(1 + E_0 \sigma^{-3} + E_0 |\mu|^2 \sigma^{-3}) < c_1 < \infty \end{aligned}$$

同样由 $E_0 |\mu| \sigma^{-2\eta-3} < \infty$, 利用引理 1 证明中出现的 $g^{(k)}(k_1, k_2; y)$ 的表达式可得

$$|\bar{x}|^2 s^{\eta-3} g_c^{(k)}(y) < c_2 < \infty$$

因此 $|\bar{x}|^{\lambda} f_i^{\lambda/2}(y) + |\bar{x}|^{\lambda} f_i^{(k)}(y) < \infty, i=0, 1$, 所以只要证

$$\int_{\mathcal{O}} |\alpha(y)|^{1-\lambda} dy < \infty$$

即可. 而这与 a 中 $i=0$ 的情形完全相同 (对 $\forall 0 < \lambda < \frac{\eta-1}{\eta+1}$ 只需取 $\zeta = \frac{(1-\lambda)(\eta-1)}{\lambda} - 2 > 0$, 同上即可得证). 因此对 $\forall 0 < \lambda < \frac{\eta-1}{\eta+1}$

$$R_n - R_o \leq O\left(n^{-\frac{\lambda(\eta-1)}{2\lambda+2}}\right)$$

定理证毕.

在本文写作过程中, 得到导师韦来生先生的多方面指导, 在此表示感谢.

参 考 文 献

- [1] Robbins H, Proc. Third Berkley Symp. Math. Statist. Probability, California Press, 1. (1955), 155-163.
- [2] Johns M V Jr. and Van Ryzin J, Ann. Math. Statist., 42(1971), 1521-1539.
- [3] Johns M V Jr. and Van Ryzin J, Ann. Math. Statist., 43(1972), 934-947.
- [4] Wei Laisheng, System Science & Mathematical Science, 2(1989), No. 4, 369-384.
- [5] 韦来生, 应用概率统计, 7(1991), No. 3, 299-310.
- [6] Tao Bo (陶波), J. Math. Res. & Exposition, 1986, No. 1, 157-162.
- [7] 张平, 系统科学与数学, 5(1985), No. 3, 185-191.

The EB Test for the Parameter of Normal Distribution Family

Yang Yaning

(Department of Mathematics)

Abstract

The purpose of this paper is to investigate the convergence behavior of the EB test for the parameter of normal family. The EB test decision rule is given. It is found that the test given is asymptotically optimal and its convergence rate is $O\left(n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2\lambda+2}}\right)$, where $k > 2$ is a suitable natural number and $0 < \lambda < 2$.

Key words: normal distribution, EB decision, a. o., convergence rate

一类障碍问题解的内部正则性

朱梅俊

(数学系)

摘 要

本文研究了下述障碍问题

$$\int_{\Omega} |\nabla v|^p dx = \min, \forall v \in \mathcal{S}_\varphi^+$$

这里, $\mathcal{S}_\varphi^+ = \{v \in C(\bar{G}) \cap W^{1,p}(G), v - \varphi \in W^{1,p}(G), \text{且 } v \geq \varphi\}$, G 是 R^n 中有界区域. 在 $p \in (1, 2)$ 的情形, 我们证实了 Lindqvist 的一个猜想, 即如果障碍函数 φ 的梯度局部 Hölder 连续, 则障碍问题的解梯度也是局部 Hölder 连续.

关键词: 解的正则性, 障碍问题, Hölder 连续, 变分不等式

中图法分类号: O175.25

AMS Subject Classifications(1991): 35D10

1 引言

考虑障碍问题:

$$\int_{\Omega} |\nabla v|^p dx = \min \quad \forall v \in \mathcal{S}_\varphi^+ \quad (1)$$

$\mathcal{S}_\varphi^+ = \{v \in C(\bar{G}) \cap W^{1,p}(G), v - \varphi \in W^{1,p}(G), \text{且 } v \geq \varphi\}$, G 是 R^n 中有界区域.

文[1]引理 2.1 指出: 上述问题等价于变分问题,

$$\int_{\Omega} |\nabla u|^{p-2} \cdot \nabla u \cdot \nabla v dx \geq 0 \quad \forall v \in W^{1,p}(G), \quad v \geq \varphi - u \quad (2)$$

在 \mathcal{S}_φ^+ 中的解.

Michael 和 Ziemer^[2]首先研究了解的 Hölder 连续性; Lindqvist 对 $n=2$ 的情形考虑了解的 $C^{1,\alpha}$ -正则性, 同时他猜测对 $n>2$ 的情形也应该有类似的结果. 之后, Fuchs^[3]考虑了 Lindqvist

的猜测,并对参数 $p \geq 2$ 的情形证明了解的 $C^{1,\alpha}$ -正则性。(当然要对障碍函数加适当的条件).

然而对 $p \in (1, 2)$ 的情形,因问题所具有的奇异性,较之当 $p \geq 2$ 时的情形难度更大,至今尚没有结果. 本文将基于[2]、[4]、[5]中有关结论,对 $p \in (1, 2)$ 的情形,证实了 Lindqvist 的猜想. 即:若 $\varphi \in C_{loc}^{1,\alpha}(G)$, 则问题(1)、(2)的解 $u \in C_{loc}^{1,\alpha_1}(G)$, 其中 α_1 依赖于 α 及其它常数,且 $0 < \alpha_1 < 1$.

本文将分为以下几个步骤:第 2 节,证明一个逼近引理,从而可以避免以下证明中可能出现的奇异性. 第 3 节,给出解梯度的一个先验估计. 第 4 节,引进一个熟知的辅助函数 U , 借助已知的结果,给出关于解梯度的一个更细致的估计. 最后,用经典的 Morse 迭代,推出一个 Harnack 类型不等式,从而推出本文主要结果.

注意到 $p < 2$, 当 $|\nabla u| = 0$ 时,定义 $|\nabla u|^{p-2} \cdot \nabla u = 0$.

2 关于奇异性的一个逼近引理

考虑到 $p < 2$ 的奇异性,我们将对充分小的 $\varepsilon > 0$, 研究下列问题

$$\int_G (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} \cdot \nabla u \cdot \nabla v \, dx \geq 0 \quad (3)$$

$$\forall v \in W_0^{1,p}(G), v \geq \varphi - u, u \in \mathcal{S}_\varphi^+$$

的解 u 的正则性.

引理 1 对于(2)的解 u 及(3)的解 u_ε , 有

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\nabla u - \nabla u_\varepsilon\|_{L^p} = 0$$

证明 由[1]知(3)与障碍问题

$$\int_G (\varepsilon + |\nabla v|^2)^{p/2} \, dx = \min, \quad \forall v \in \mathcal{S}_\varphi^+ \quad (4)$$

同解.

注意到 $u, u_\varepsilon \in \mathcal{S}_\varphi^+$, 由(1)式,我们有: $\|\nabla u\|_{L^p} \leq \|\nabla u_\varepsilon\|_{L^p}$; 又由(4)式,有: $\int_G (\varepsilon + |\nabla u_\varepsilon|^2)^{p/2} \, dx \leq \int_G (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2} \, dx$, 从而 $\|\nabla u_\varepsilon\|_{L^p} \leq \|\sqrt{\varepsilon} + |\nabla u|\|_{L^p}$.

因为 G 是有界区域, 所以 $1 + |\nabla u| \in L^p(G)$, 由控制收敛定理知: $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\nabla u_\varepsilon\|_{L^p} = \|\nabla u\|_{L^p}$. 又: \mathcal{S}_φ^+ 是凸集, 由 L^p 空间的均匀凸性^[8], 得到 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\nabla u_\varepsilon - \nabla u\|_{L^p} = 0$.

3 解梯度的界

下面主要考虑方程(3)的解的性质. 为方便计, 简记 u_ε 为 u , 并设障碍函数 $\varphi \in C_{loc}^{1,\alpha}(G)$.

要证明(3)的解 u 梯度的局部 Hölder 连续性, 只须证明在 G 中任一点 x_0 的某一邻域内 ∇u 的 Hölder 连续性即可.

引理 2 对任意的 $\varepsilon \geq 0$, 及 $x \geq 0$, 当 $p \in (1, 2)$ 时, 总有

$$[(\varepsilon + x^2)^{p/2-1} \cdot x]^q \leq (\varepsilon + x^2)^{p/2-1} \cdot x^2 \quad (5)$$

其中 q 为 p 的共轭数.

证明 由 $(\frac{p}{2} - 1)(q - 1) = \frac{1}{2}(2 - q)$, 及 $q > 2$ 得 $(\varepsilon + x^2)^{(\frac{p}{2}-1)(q-1)} x^q \leq x^2$, 移项得证.

下面给出 ∇u 的 L^r 估计.

引理 3 对方程(3)的解 u , 当 $\varepsilon \in (0, 1)$ 时, 存在常数 θ, c_1, r_1 , 使得对任意 $\rho \leq r_1$, 有

$$\int_{B(x_0, \rho)} |\nabla u|^r dx \leq c_1 \rho^{n+r(\theta-1)} \quad (6)$$

证明 首先取定 $\rho_0 > 0$, 使得球 $B(x_0, 2\rho_0) \subset\subset G$. 对给定的 $\rho > 0$, 当 $\rho < \rho_0$ 时, 作截断函数 $\zeta(x) \in C_b^1(G)$, 使得 $\zeta(x) = \begin{cases} 1 & x \in B(x_0, \rho) \\ 0 & x \notin B(x_0, 2\rho) \end{cases}$, 且有 $|\nabla \zeta| < \frac{2}{\rho}$, 及 $0 \leq \zeta(x) \leq 1$.

令 $v = -[u - u(x_0) - \varphi + \varphi(x_0)]^+ \zeta^r$, 则易验证 $v \in W_b^{1,r}(G)$. 注意到 $u \geq \varphi$, 因而有: $v + u - \varphi = (u - \varphi)(1 - \zeta^r) + \{u - \varphi - [u - u(x_0) - \varphi + \varphi(x_0)]^+\} \cdot \zeta^r \geq 0$, 这样的 v 可作(3)式的检验函数. 记 $\Omega^+ = B(x_0, 2\rho) \cap \{x : u - u(x_0) - \varphi + \varphi(x_0) \geq 0\}$, 则

$$\nabla v = \begin{cases} 0 & x \notin \Omega^+ \\ -(\nabla u - \nabla \varphi)\zeta^r - p \cdot \nabla \zeta \cdot \zeta^{r-1}[u - u(x_0) - \varphi + \varphi(x_0)] & x \in \Omega^+ \end{cases}$$

代入(3)式

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u|^2 \zeta^r dx &\leq \int_{\Omega^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u| \cdot |\nabla \varphi| \zeta^r dx \\ &+ p \int_{\Omega^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u| \cdot |\nabla \zeta| \cdot \zeta^{r-1} [u - u(x_0) - \varphi + \varphi(x_0)] dx \end{aligned} \quad (7)$$

由文[3], 及已知条件 $\varphi \in C_{loc}^{1,\alpha}(G)$ 知: 存在 $E_1, E_2 > 0$, 及 $\theta \in (0, 1)$, 当 $x, y \in B(x_0, 2\rho)$ 时, 有: $|u(x) - u(y)| < E_1 |x - y|^\theta$, $|\varphi(x) - \varphi(y)| < E_2 |x - y|$, $|\nabla \varphi| < E_2$. 取定 $\rho_1 < \min(1, \rho_0)$, 使得当 $x \in B(x_0, 2\rho_1)$ 时, 有: $E_2 |x - x_0| < E_1 |x - x_0|^\theta$.

又记: $\Omega_1^+ = \{x : |\nabla u| \geq 1\} \cap \Omega^+$, 当 $\rho < \rho_1$ 时,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u|^2 \zeta^r dx &\leq E_2 \int_{\Omega_1^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u| \zeta^r dx \\ &+ E_2 \int_{\Omega^+ \setminus \Omega_1^+} |\nabla u|^{r-1} \zeta^r dx + 2pE_1 \int_{\Omega^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u| \cdot \rho^{r-1} \cdot \zeta^{r-1} dx \\ &\leq \frac{1}{3} \int_{\Omega_1^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u|^2 \zeta^r dx + \frac{c_1}{18} \int_{\Omega_1^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} \zeta^r dx \\ &+ \frac{c_1}{18} \int_{\Omega^+ \setminus \Omega_1^+} |\nabla u|^{r-1} \zeta^r dx \leq \frac{2}{3} \int_{\Omega^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u|^2 \zeta^r dx \\ &+ \frac{c_1}{6} \rho^{n+r(\theta-1)} \end{aligned}$$

上式推导用到了 Young 不等式及引理 2. 从而

$$\int_{\Omega^+} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u|^2 \zeta^r dx \leq \frac{c_1}{2} \rho^{n+r(\theta-1)} \quad (8)$$

同理, 记 $\Omega^- = B(x_0, 2\rho) \cap \{x : u - u(x_0) - \varphi + \varphi(x_0) < 0\}$, 令 $v = -[u - u(x_0) - \varphi + \varphi(x_0)]^- \zeta^r$, 有

$$\int_{\Omega^-} (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u|^2 \zeta^r dx \leq \frac{c_1}{2} \rho^{n+r(\theta-1)} \quad (8')$$

这里 $c_1 = c(E_1, E_2, n, p) > 0$.

当 $|\nabla u| \geq 1$ 时, $|\nabla u|^r \leq (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2} = (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2} \cdot |\nabla u|^2 + \varepsilon \cdot (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} \leq (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla u|^2 + 1$, 取 $r_1 = \rho_1$, 便得到: 当 $\rho < r_1$ 时,

$$\int_{B(x_0, \rho)} |\nabla u|^p dx \leq c_1 \rho^{n+p(\theta-1)} \tag{9}$$

4 一个辅助函数及其性质

设 U 满足 $U-u \in W^{1,p}(B(x_0, \rho))$, 这里 $\rho \leq r_1$, 参数 r_2 将在行文中确定, 且 U 是 $B(x_0, \rho)$ 中的 p -harmonic 函数^[1], 即

$$\int_{B(x_0, \rho)} \nabla v \cdot \nabla U \cdot (\varepsilon + |\nabla U|^2)^{p/2-1} dx = 0 \tag{10}$$

$\forall v \in W^{1,p}(B(x_0, \rho))$.

首先给出关于 U 的梯度的 L^p 估计.

引理 4 当 $\rho < r_1, \varepsilon < 1$ 时, 存在 $c_2 > 0$, 对 (10) 中 U , 成立下式

$$\int_{B(x_0, \rho)} |\nabla U|^p dx \leq \int_{B(x_0, \rho)} (\varepsilon + |\nabla U|^2)^{p/2} dx \leq c_2 \rho^{n+p(\theta-1)} \tag{11}$$

证明 在 (10) 式中, 令 $v = U - u \in W^{1,p}(B(x_0, \rho))$, 有

$$\int_{B(x_0, \rho)} |\nabla U|^2 (\varepsilon + |\nabla U|^2)^{p/2-1} dx \leq \int_{B(x_0, \rho)} \nabla u \cdot \nabla U \cdot (\varepsilon + |\nabla U|^2)^{p/2-1} dx$$

由 Young 不等式及引理 2, 立即得到

$$\int_{B(x_0, \rho)} |\nabla U|^2 \cdot (\varepsilon + |\nabla U|^2)^{p/2-1} dx \leq c \int_{B(x_0, \rho)} |\nabla u|^p dx \leq c \cdot c_1 \rho^{n+p(\theta-1)}$$

从而

$$\begin{aligned} \int_{B(x_0, \rho)} (\varepsilon + |\nabla U|^2)^{p/2} dx &= \int_{B(x_0, \rho)} \varepsilon \cdot (\varepsilon + |\nabla U|^2)^{p/2-1} dx \\ &+ \int_{B(x_0, \rho)} |\nabla U|^2 \cdot (\varepsilon + |\nabla U|^2)^{p/2-1} dx \leq 2 \max(1, c \cdot c_2) \rho^{n+p(\theta-1)} \end{aligned}$$

记 $c_2 = 2 \max(1, c c_1)$, 得证.

由文[5]推论 3.3, 文[2]定理 1, 我们有

引理 5 设 $\varepsilon < 1, \rho < r_1$, 则存在不依赖于 ρ 及 ε 的常数 $\gamma, c > 0$, 使得

$$\forall \text{r} \max_{B(x_0, \rho/2)} |\nabla U| \leq c \left[\frac{1}{\rho^\gamma} \int_{B(x_0, \rho)} (1 + |\nabla U|^p) dx \right]^{\frac{1}{p}} \tag{12}$$

$$\forall \text{r} \max_{x, y \in B(x_0, \rho/2)} |\nabla U(x) - \nabla U(y)| \leq c \left(\frac{|x-y|}{\rho} \right)^\gamma \cdot \left[\frac{1}{\rho^\gamma} \int_{B(x_0, \rho)} (1 + |\nabla U|^p) dx \right]^{\frac{1}{p}} \tag{13}$$

由 (12) 式及引理 4 知: 当 $\rho < r_1$ 时, 存在常数 c_3 (不依赖于 ρ), 有

$$\forall \text{r} \max_{B(x_0, \rho/2)} |\nabla U| \leq c_3 \rho^{\theta-1} \tag{14}$$

下记: $A(\nabla u) = \nabla u \cdot (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1}$, $a_{ij} = \frac{\partial A_i}{\partial p_j}$, 于是

$$a_{ij} = (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} [(p-2)u_{,i}u_{,j}(\varepsilon + |\nabla u|^2)^{-1} + \delta_{ij}]$$

$$(p-1)(\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla \xi|^2 \leq (a_{ij}(\nabla u) \xi_{,i} \xi_{,j}) \leq (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1} |\nabla \xi|^2 \tag{15}$$

(参见文[4]中 (2,3), (2,4) 式.)

记: $L_1(\rho) = \{x: |\nabla u| > 3c_3\rho^{\theta-1}\} \cap B(x_0, \frac{\rho}{2}), L_2(\rho) = B(x_0, \frac{\rho}{2}) \setminus L_1(\rho)$. 由(15)式, 有

$$[A(\nabla U) - A(\nabla u)] \cdot (\nabla U - \nabla u) = \int_0^1 a_{ij}[\nabla u + t(\nabla U - \nabla u)](U_{x_i} - u_{x_i}) \cdot (U_{x_j} - u_{x_j}) dt$$

$$\geq (p-1) \int_0^1 (\varepsilon + |\nabla u + t(\nabla U - \nabla u)|^{2/p-1}) |\nabla U - \nabla u|^2 dt$$

当 $x \in L_1(\rho)$ 时, 因为 $\forall \varepsilon \max_{B(x_0, \rho/2)} |\nabla U| \leq c_3\rho^{\theta-1}$, 所以 $\varepsilon + |\nabla u + t(\nabla U - \nabla u)| \leq 2(\varepsilon + 2|\nabla U - \nabla u| + |\nabla U|) \leq 8|\nabla U - \nabla u|$ (只须取 $\varepsilon \leq \varepsilon_0 = (c_3\rho^{\theta-1})^2$ 即可), 也就是: 当 $\varepsilon \leq \varepsilon_0$ 时, 成立

$$[A(\nabla U) - A(\nabla u)] \cdot (\nabla U - \nabla u) \geq (p-1)8^{\frac{p-1}{2}} |\nabla U - \nabla u|^p = c|\nabla U - \nabla u|^p \quad (16)$$

当 $x \in L_2(\rho)$ 时, 只要 $\varepsilon \leq \varepsilon_0$, 就有: $\varepsilon + |\nabla u + t(\nabla U - \nabla u)| \leq 50(c)^2 \cdot \rho^{2(\theta-1)}$, 因而

$$[A(\nabla U) - A(\nabla u)] \cdot (\nabla U - \nabla u) \geq (p-1)50(c)^2 \rho^{(p-1)(\theta-2)} |\nabla U - \nabla u|^2 = c_4 \rho^{(p-1)(\theta-2)} |\nabla U - \nabla u|^2 \quad (17)$$

注意: (16)、(17)式在 $B(x_0, \rho/2)$ 上几乎处处成立. 另外

$$|A(\nabla \varphi) - A(\nabla \varphi(x_0))| = \left| \int_0^1 a_{ij}[\nabla \varphi(x_0) + t(\nabla \varphi - \nabla \varphi(x_0))](\varphi_{x_i} - \varphi_{x_i}) dt \right| \leq 2 \int_0^1 (\varepsilon + |\nabla \varphi(x_0) + t(\nabla \varphi - \nabla \varphi(x_0))|^{2/p-1}) |\nabla \varphi - \nabla \varphi(x_0)| dt \quad (18)$$

上式推导中用到了 $|a_{ij}(\nabla u)| \leq 2(\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p/2-1}$ 这个事实.

当 $\nabla \varphi(x_0) \neq 0$ 时, 由 $\varphi \in C_{loc}^\alpha(G)$ 知: 存在 $\rho_2 < \rho_1$, 使得 $\rho < \rho_2$ 时 $|\nabla \varphi - \nabla \varphi(x_0)| < 1$, 且 $|\nabla \varphi(x_0) + t(\nabla \varphi - \nabla \varphi(x_0))| \geq \frac{1}{2} |\nabla \varphi(x_0)|, x \in B(x_0, \rho)$. 代入(18)式,

$$|A(\nabla \varphi) - A(\nabla \varphi(x_0))| \leq \left(\frac{1}{2} |\nabla \varphi(x_0)| \right)^{p-2} |\nabla \varphi - \nabla \varphi(x_0)| \leq c_5 |\nabla \varphi - \nabla \varphi(x_0)|^{p-1} \quad (19)$$

其中 $c_5 = \left(\frac{1}{2} |\nabla \varphi(x_0)| \right)^{p-2} > 0$.

当 $\nabla \varphi(x_0) = 0$ 时, (19)式同样成立, 只是 c_5 略作变动而已.

以下记 $U \vee \varphi = \max(U, \varphi)$

当 $\max_{B(x_0, \rho_2)} |\nabla \varphi(x)| \neq 0$ 时, 记 $M = \max_{B(x_0, \rho_2)} |\nabla \varphi(x)|, S_1(\rho) = \{x: U \leq \varphi\} \cap B(x_0, \rho) \cap \{x: |\nabla U| \leq 4M\}, S_2(\rho) = \{x: U \leq \varphi\} \cap B(x_0, \rho) \cap \{x: |\nabla U| > 4M\}$. 类似于(16)、(17)式的推导, 有

$$[\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)] \cdot [A(\nabla U) - A(\nabla(U \vee \varphi))] \geq cM^{p-2} |\nabla U - \nabla \varphi|^2, x \in S_1(\rho) \quad (20)$$

$$[\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)] \cdot [A(\nabla U) - A(\nabla(U \vee \varphi))] \geq c|\nabla U - \nabla \varphi|^p, x \in S_2(\rho) \quad (21)$$

当 $\max_{B(x_0, \rho_2)} |\nabla \varphi| = 0$ 时, 记 $S_1(\rho) = \{x: U \leq \varphi\} \cap B(x_0, \rho) \cap \{x: |\nabla U| < 1\}, S_2(\rho) = \{x: U \leq \varphi\} \cap B(x_0, \rho) \cap \{x: |\nabla U| \geq 1\}$. 同样可得(20)、(21)两式, 只是系数略有变化, 但仍不依赖于 ρ .

下面只考虑 $M \neq 0$ 的情形. 取定 $r_2 = \rho_2$, 并记 $E_3 = \max_{B(x_0, r_2)} \frac{|\nabla \varphi(x) - \nabla \varphi(y)|}{|x - y|^\alpha}$.

引理 6 当 $\rho \leq r_2, \varepsilon \leq \varepsilon_0$ 时,

$$\int_{s_1(\rho)} |\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)|^2 dx + \int_{s_2(\rho)} |\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)|' dx \leq c_6 \rho^{\alpha+2(\rho-1)\alpha} \quad (22)$$

其中 $c_6 = c(\min(c, cM^{\rho-2}), C_5, E_3)$.

证明 注意到 $U - U \vee \varphi \in W_0^{1,p}(B(x_0, \rho))$, 由(10)、(20)、(21)式, 得

$$\begin{aligned} & cM^{\rho-2} \int_{s_1(\rho)} |\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)|^2 dx + c \int_{s_2(\rho)} |\nabla u - \nabla(u \vee \varphi)|' dx \\ & \leq \int_{B(x_0, \rho)} (\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)) \cdot [A(\nabla U) - A(\nabla(U \vee \varphi))] dx \\ & = \int_{B(x_0, \rho)} (\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)) \cdot [A(\nabla \varphi(x_0)) - A(\nabla \varphi)] dx \\ & \leq c_5 \int_{B(x_0, \rho)} |\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)| \cdot |\nabla \varphi - \nabla \varphi(x_0)|^{\rho-1} dx \\ & \leq c_5 (E_3)^{\rho-1} \int_{B(x_0, \rho)} |\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)| \cdot \rho^{(\rho-1)\alpha} dx \end{aligned}$$

由 Young 不等式可得

$$\begin{aligned} & \int_{s_1(\rho)} |\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)|^2 dx + \int_{s_2(\rho)} |\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)|' dx \\ & \leq \frac{c_6}{2} (\rho^{\alpha+2(\rho-1)\alpha} + \rho^{\alpha+2\alpha}) \leq c_6 \rho^{\alpha+2(\rho-1)\alpha} \end{aligned}$$

引理 7 当 $\rho \leq \gamma_2, v \leq e_0$ 时, 有

$$\int_{B(x_0, \rho/2)} |\nabla U - \nabla u|' dx \leq c_7 \rho^{\alpha + \frac{\rho}{2}[(\rho-1)\alpha + \theta - 1]} \quad (23)$$

其中 $c_7 = c(c_1, c_2, c_4, c_6)$.

证明 联立(3)式和(10)式, 有

$$\int_{B(x_0, \rho)} \nabla v \cdot [A(\nabla U) - A(\nabla u)] dx \leq 0 \quad (24)$$

$\forall v \in W_0^{1,p}(B(x_0, \rho))$, 且 $v \geq \varphi - u$

取 $v = U \vee \varphi - u$, 代入(24)式

$$\int_{B(x_0, \rho)} [\nabla(U \vee \varphi) - \nabla u] \cdot [A(\nabla U) - A(\nabla u)] dx \leq 0 \quad (25)$$

注意到: $(\nabla U - \nabla u) \cdot (A(\nabla U) - A(\nabla u)) \geq 0$, 由(16)、(17)、(25)式得

$$\begin{aligned} & c \int_{L_1(\rho)} |\nabla U - \nabla u|' dx + c_4 \rho^{(\theta-1)(\rho-2)} \int_{L_1(\rho)} |\nabla U - \nabla u|^2 dx \\ & \leq \int_{B(x_0, \rho/2)} (\nabla U - \nabla u) (A(\nabla U) - A(\nabla u)) dx \\ & \leq \int_{B(x_0, \rho)} (\nabla U - \nabla u) (A(\nabla U) - A(\nabla u)) dx \\ & \leq \int_{B(x_0, \rho)} [\nabla U - \nabla(U \vee \varphi)] \cdot [A(\nabla U) - A(\nabla u)] dx \\ & \leq \left(\int_{s_1(\rho)} |\nabla(U \vee \varphi) - \nabla U|^2 dx \right)^{1/2} \left[\left(\int_{s_1(\rho)} |A(\nabla U)|^2 dx \right)^{1/2} + \left(\int_{s_1(\rho)} |A(\nabla u)|^2 dx \right)^{1/2} \right] \end{aligned}$$

$$+ \int_{S_2(\rho)} (|\nabla(U \vee \varphi) - \nabla U|^2 dx)^{1/p} \cdot (\|A(\nabla U)\|_{L^p} + \|A(\nabla U)\|_{L^p}) \quad (26)$$

又,从引理 3 可知

$$\begin{aligned} \int_{S_1(\rho)} |A(\nabla u)|^2 dx &= \int_{S_1(\rho)} |\nabla u|^2 (\varepsilon + |\nabla u|^2)^{p-2} dx \\ &\leq \int_{S_1(\rho)} |\nabla u|^{2p-2} dx \leq c \cdot c_1 \rho^{\alpha+2(2p-2)(\theta-1)} \end{aligned}$$

同理,由引理 3,引理 4 可得

$$\begin{aligned} \int_{S_1(\rho)} |A(\nabla U)|^2 dx &\leq c \cdot c_2 \rho^{\alpha+(2p-2)(\theta-1)}, \int_{S_2(\rho)} |A(\nabla u)|^2 dx \leq c \cdot c_1 \rho^{\alpha+p(\theta-1)}, \int_{S_2(\rho)} |A(\nabla U)|^2 dx \\ &\leq c \cdot c_2 \rho^{\alpha+p(\theta-1)}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &c \cdot \int_{L_1(\rho)} |\nabla U - \nabla u|^2 dx + c_4 \rho^{(\theta-1)(p-2)} \int_{L_2(\rho)} |\nabla U - \nabla u|^2 dx \\ &\leq \bar{c}_7 [\rho^{\frac{\alpha}{2} + (\theta-1)\alpha + \frac{\alpha}{2} + (\theta-1)(\theta-1)} + \rho^{\frac{\alpha}{p} + \frac{2(p-1)\alpha}{p} + \frac{\alpha}{q} + \frac{\theta(\theta-1)}{q}}] \\ &\leq 2\bar{c}_7 \rho^{\alpha + (\theta-1)(\theta-1+\alpha)} \end{aligned}$$

其中 $\bar{c}_7 = c(c_1, c_2, c_8)$. 从而有

$$\begin{aligned} \int_{L_1(\rho)} |\nabla U - \nabla u|^2 dx &\leq c_7 \rho^{\alpha + (\theta-1)(\theta-1+\alpha)} \\ \int_{L_2(\rho)} |\nabla U - \nabla u|^2 dx &\leq c \cdot \left(\int_{L_2(\rho)} |\nabla U - \nabla u|^2 dx \right)^{1/2} \cdot \rho^{\alpha(1-\frac{1}{p})} \\ &\leq c_7 \rho^{\alpha + \frac{1}{2}[(\theta-1)\alpha + \theta - 1]} \end{aligned}$$

注意到 $0 < p-1 < \frac{p}{2} < 1$, 综合上述式子即可得证.

5 定理的导出

我们记: $p(\theta_1 - 1) = \frac{p}{2}[(p-1)\alpha + \theta - 1]$; $p(\theta_{k+1} - 1) = \frac{p}{2}[(p-1)\alpha + \theta_k - 1]$, $k = 1, 2, \dots$. 当 $\theta, \theta_k \leq 1$ 时, 有

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \frac{1}{2}(p-1)\alpha + \frac{\theta+1}{2} > 0 \\ \theta_{k+1} &= \frac{1}{2}(p-1)\alpha + \frac{\theta_{k+1}}{2} > \theta_k \end{aligned}$$

若 $\theta_1 < 1$, 由引理 4 的推导过程及引理 5、引理 6, 可以得到: 当 $r < r_2/2$ 时

$$\begin{aligned} \int_{B(x_0, r)} |\nabla u|^2 dx &\leq c \left(\int_{B(x_0, r)} |\nabla U|^2 dx + \int_{B(x_0, r)} |\nabla U - \nabla u|^2 dx \right) \\ &\leq c \left(\frac{r}{r_2} \right)^\alpha \int_{B(x_0, r)} (|\nabla u|^2 + 1) dx + c r^{\alpha+p(\theta_1-1)} \end{aligned} \quad (27)$$

当 $r_2/2 < r \leq r_2, \varepsilon < \varepsilon_0$ 时, 取 $c > 2^\alpha$, (27) 式同样成立.

由 Morrey 引理(例如见[7]中引理 4.1), (27) 式表明 $u \in C^{0, \theta_1}(B(x_0, r_2))$. 这样又回到了引理 3 的出发点, 只是以较大的 θ_1 代替了原先的 θ . 注意到 $\lim_{k \rightarrow +\infty} \theta_k = (p-1)\alpha + 1 > 1$, 因此, 经

过有限次循环运算, 有下列事实成立:

存在 $r_{n+1} \in (0, 1)$, $\varepsilon_{n-1} > 0$, 及有如此定义的 $\bar{U}; \bar{U} - u \in W_0^{1,p}(B(x_0, \rho))$, 满足

$$\int_{B(x_0, \rho)} \nabla v \cdot \nabla \bar{U} \cdot (\varepsilon + |\nabla \bar{U}|^2)^{p/2-1} dx = 0$$

$$\forall v \in W_0^{1,p}(B(x_0, \rho)), \rho \leq r_{n+1}$$

以及 $\theta_{n-1} < 1 < \theta_n$ (记 $\theta_0 = 0$), 使得当 $\rho < r_{n+1}$, $\varepsilon < \varepsilon_{n-1}$ 时, 有

$$\int_{B(x_0, \rho/2)} |\nabla \bar{U} - \nabla u|^p dx \leq \bar{c}_7 \rho^{\alpha + p(\theta_n - 1)} \tag{28}$$

\bar{c}_7 与 ρ 无关.

记 $(\nabla u)_{x_0, \rho}$ 为 ∇u 在 $B(x_0, \rho)$ 球内的平均值. 由引理 5 及 (28) 式, 当 $r < \frac{r_{n+1}}{2}$, $\varepsilon < \varepsilon_{n-1}$ 时, 有

$$\begin{aligned} & \int_{B(x_0, r)} |\nabla u - (\nabla u)_{x_0, r}|^p dx \\ & \leq c \cdot \left(\int_{B(x_0, r)} |\nabla \bar{U} - (\nabla \bar{U})_{x_0, r}|^p dx + \int_{B(x_0, r)} |\nabla \bar{U} - \nabla u|^p dx \right) \\ & \leq \bar{c} \cdot r^\alpha \cdot \left(\frac{r}{r_{n+1}} \right)^{p\alpha} \cdot \left(\frac{1}{r_{n+1}^\alpha} \int_{B(x_0, r_{n+1})} (1 + |\nabla \bar{U}|^p) dx \right) \\ & \quad + \bar{c} r^{\alpha + p(\theta_n - 1)} \leq \bar{c} \cdot c(r_{n+1}) \cdot r^{\alpha + p\alpha_1} \end{aligned} \tag{29}$$

其中 $c(r_{n+1})$ 是与 r_{n+1} 有关, 与 r 无关的常数, \bar{c} 也不依赖于 r , $\alpha_1 = \min(\gamma, \theta_n - 1)$.

当 $r_{n+1}/2 < r < r_{n+1}$, $\varepsilon < \varepsilon_{n-1}$ 时, 有

$$\begin{aligned} & \int_{B(x_0, r)} |\nabla u - (\nabla u)_{x_0, r}|^p dx \leq c \int_{B(x_0, r)} |\nabla u|^p dx \\ & \leq \bar{c} \left(\frac{r}{r_{n+1}} \right)^{\alpha + p\alpha_1} \int_{B(x_0, r_{n+1})} |\nabla u|^p dx \leq \bar{c} \cdot \bar{c}(r_{n+1}) r^{\alpha + p\alpha_1} \end{aligned} \tag{30}$$

其中 $\bar{c} = 2^{\alpha + p\alpha_1} \cdot c, \bar{c}(r_{n+1})$ 是只与 r_{n+1} 有关, 与 r 无关的常数. 因此, 综合 (29)、(30) 式, 由文 [6] 中第三章定理 1.3, 有

定理 1 存在 $E > 0$, 当 $\varepsilon < E$, 障碍函数 $\varphi \in C_{loc}^{1,\alpha}(G)$ 时, (3) 式问题的解 $u_\varepsilon \in C_{loc}^{1,\alpha_1}(G)$, 且 α_1 及 Hölder 系数均与 ε 无关.

至此, 我们可以得出本文主要结论:

定理 2 对于问题 (1) 或 (2), 若给定障碍函数 $\varphi \in C_{loc}^{1,\alpha}(G)$, 则存在 $\alpha_1 \in (0, 1)$, 使得 (1) 或 (2) 的解 $u \in C_{loc}^{1,\alpha_1}(G)$. 其中 α_1 依赖于 α 及其它常数.

证明 综合引理 1、(29)、(30) 或及 [5] 中定理 1.3, 立即得证.

注: 对于广泛的变分问题

$$\begin{aligned} & \int_G \{ \nabla v \cdot \bar{A}(x, u, \nabla u) + v \cdot \bar{B}(x, u, \nabla u) \} dx \geq 0 \\ & \forall v \in W_0^{1,p}(G), v \geq \varphi - u, u \in \mathcal{F}_\varphi^+ \end{aligned}$$

在下列结构条件下

$$\begin{aligned} & \nabla u \cdot \bar{A}(x, u, \nabla u) \geq k^{-1} |\nabla u|^p - c|u|^p - c \\ & |\bar{A}(x, u, \nabla u)| \leq k |\nabla u|^{p-1} + c|u|^p + c \\ & |\bar{B}(x, u, \nabla u)| \leq c |\nabla u|^{p-1} + c|u|^{p-1} + c \end{aligned}$$

$k \geq 1, c \geq 0$ 均为实数, $p \in (1, 2)$

应用本文的方法, 也可得到类似于定理 2 的结果.

感谢导师陈祖埤给予的热情指导和帮助.

参 考 文 献

- [1] Lindqvist, *Nonlinear Analysis, TMA.*, 12(1988), No. 11, 1245-1255.
- [2] Michael J H, Ziemer W P, *Nonlinear Analysis, TMA.*, 10(1986), No. 12, 1427-1448.
- [3] Martin Fuchs, *Nonlinear Analysis, TMA.*, 15(1990), No. 1, 85-100.
- [4] Lewis, *Indian Univ. Math. J.*, 32(1983), No. 6, 849-858.
- [5] Dibenedetto E, *Nonlinear Analysis, TMA.*, 7(1983), No. 8, 827-850.
- [6] Giaquinta G, *Multiple Integrals in the Calculus of Variations and Nonlinear Elliptic Systems*, Princeton Press, 1983: 72-73.
- [7] O. A. 拉迪任斯卡娅, H. H. 乌拉利采娃著, 严子谦等译, 线性和拟线性椭圆型方程, 科学出版社, 1987: 75-78.
- [8] Adams R, *Sobolev Space*, Academic Press, N. Y., 1975: 34-38.

Local $C^{1,\alpha}$ Regularity of Solution for Certain Obstacle Problem

Zhu Meijun

(Department of Mathematics)

Abstract

In this paper, we study following obstacle problem:

$$\int_{\Omega} |\nabla v|^p dx = \min \quad \forall v \in \mathcal{F}_{\varphi}^+$$

where $\mathcal{F}_{\varphi}^+ = \{v \in C(\bar{\Omega}) \cap W^{1,p}(\Omega), v - \varphi \in W_0^{1,p}(\Omega), \text{ and } v \geq \varphi\}$. Ω is a boundary domain in R^n . In the case of $p \in (1, 2)$, Lindqvist's hypothesis is proved, that is: if the obstacle function $\varphi \in C_{loc}^{1,\alpha}$, then the solution of the above problem is C_{loc}^{1,α_1} too, where α_1 depends on α and some other constants.

Key words: regularity of solution, obstacle problem, Hölder continuous, variational inequality

铬-铈氧化物的催化活性和 掺碱(土)元素的影响

单绍纯 陈少伟 伏羲路

(近代化学系)

摘 要

研究了 Cr-Ce 二元氧化物催化剂对甲苯完全氧化的性能,以及掺碱(土)金属元素对其活性的影响. 实验表明, $\frac{\text{Cr}}{\text{Cr} + \text{Ce}}$ (原子比) 在 0.5—0.7 时, 催化剂有最佳活性. 碱(土)金属元素的掺加, 改善了 Cr-Ce 体系对甲苯完全氧化反应的活性, 并随掺入元素的碱性增大而提高. 其中以钾的掺入效果最优. 钾含量的增加, 氧化活性随之提高, 在 $\frac{\text{K}}{\text{Cr} + \text{Ce}}$ (原子比) = 0.05—0.10 时最佳. 再增大钾的含量, 无益于催化剂活性的改善.

关键词: 氧化物催化剂, 甲苯氧化, 催化活性

中图法分类号: O643.361

1 前言

用稀土或其他非贵金属(复合)氧化物取代净化工业有机废气的贵金属催化剂具有重要的理论意义和实用价值^[1]. 本文作者曾以甲苯为工业有机废气模拟气, 初步研究探讨了稀土与第四周期过渡金属二元氧化物催化剂对甲苯完全氧化性能的规律, 得到了 Cr-Ce 体系具有最佳的氧化活性. 并发现, 含铈二元过渡金属氧化物催化剂有类似单组份过渡金属氧化物的活性变化规律, 又具有更好的氧化反应活性. 不过这种高的活性不能得以保持, 在中等转化率时出现负温度效应. 即反应温度上升, 甲苯的转化率反而下降的现象. 本文进一步选择最佳的 Cr-Ce 组份比例, 并通过掺碱(土)金属元素来提高对甲苯完全氧化的稳定活性.

2 实验部分

2.1 催化剂的制备

将硝酸铬、亚硝酸铈配制成所需计量的混合溶液,等量浸渍于 γ - Al_2O_3 载体(抚顺石油三厂产),经烘干得 A 系列样品的前驱体. 然后经 350°C 分解、 800°C 焙烧制得 A 系列样品. 它们的铬、铈比例列于表 1.

表 1 A 系列样品的铬铈比

样品号	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅
Cr : Ce (原子比)	1 : 0	0.7 : 0.3	0.5 : 0.5	0.3 : 0.7	0 : 1

以 A₃ 为空白样品,按所需钾含量的氢氧化钾溶液等量浸渍于 A₃ 样品,即为 B 系列样品的前驱体. 然后再经烘干、 600°C 焙烧制得 B 系列样品. B 系列样品中的钾含量列于表 2.

表 2 B 系列样品的钾含量

样品号	B ₁	B ₂	B ₃	B ₄	B ₅
$\frac{\text{K}}{\text{Cr}+\text{Ce}}$ (原子比)	0	0.05	0.10	0.20	0.40

以 A₃ 为空白样品,按碱(土)元素含量为 $\frac{\text{M}}{\text{Cr}+\text{Ce}}$ (原子比) = 0.10 的碱溶液或碱土硝酸盐溶液等量浸渍于 A₃ 样品得 C 系列样品前驱体,然后经烘干、 600°C 焙烧制得 C 系列样品(表 3).

表 3 C 系列样品的不同掺加元素

样品号	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	C ₆	C ₇	C ₈
掺入元素	—	Li	Na	K	Mg	Ca	Sr	Ba

2.2 活性评价

甲苯完全氧化活性的测定是在微型连续反应器中进行. 甲苯反应气自配,甲苯含量为 0.1%,其余为空气. 催化剂装量为 200mg,空速为 9000h^{-1} . 反应气、尾气用上海分析仪器厂的 102G 气相色谱仪分析,用氢焰检测器检测. 以测定尾气中甲苯残留量,计算出各相应温度下的转化率. 除个别样品发现少量中间氧化物外,一般均只有甲苯峰.

2.3 催化剂前驱体的差热分析

在上海天平仪器厂产的 CDR-1 型差动热分析仪上进行. 量程为 $\pm 100\mu\text{V}$,升温速率 $10^\circ\text{C}/\text{min}$,前驱体装量为 40mg.

催化剂的晶体结构分析是在日本理学电机 D/MAX-RA 型 X 射线衍射仪上进行. $\text{CuK}\alpha$ 线, Ni 片滤波.

3 结果与讨论

3.1 不同 Cr-Ce 组份比例对氧化活性的影响

A 系列样品的甲苯氧化活性对反应温度的曲线示于图 1. 由图可见,单组份 Cr 的 A₁ 样品对甲苯氧化活性较差,单组份 Ce 的 A₅ 样品的氧化活性更差;在反应温度高至 400℃ 时也只有 80% 左右的转化率. 其余二元组份的样品,其氧化活性都优于单组份 Cr 或 Ce 的样品. 由图 2 可见,最佳活性样品的 $\frac{Cr}{Cr+Ce}$ (原子比) 在 0.5-0.7 之间. 在 80% 转化率时,反应温度比纯 Cr 样品低 20℃ 左右;比纯 Ce 样品低 70℃ 左右. 由此可以认为,在 Cr-Ce 二元氧化物催化剂中,Cr 组份是作为主催化剂而 Ce 组份是起助剂的作用.

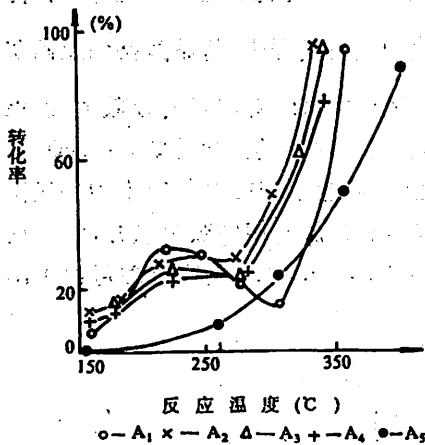


图 1 A 系列样品活性曲线

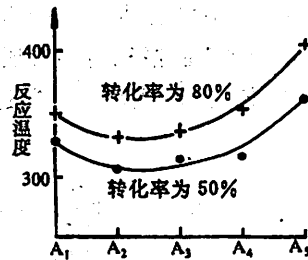


图 2 相同转化率下,反应温度随 Cr-Ce 比的变化

图 3b-e 为 A₁-A₅ 样品的前驱体 DTA 谱线. 在每条谱线的 100℃ 左右处都有一脱水的吸热峰存在. 在 240℃ 左右, A₅ 样品上未出现差热峰,但在 A₄-A₁ 样品上出现吸热峰,并逐渐增大. 也就是说,240℃ 的吸热峰是随着硝酸铬的出现而出现,并随其含量的增加而增大. 在 415℃ 左右, A₁ 样品上不出现差热峰,而 A₂-A₅ 样品上出现吸热峰,并按 A₂-A₅ 顺序逐渐增大. 即随着样品中的亚硝酸铈的出现而出现,也随其含量增高而增大. 因此可以认为,240℃ 和 415℃ 的两个吸热峰分别为硝酸铬和亚硝酸铈的分解峰. 除上述三个吸热峰外,所有样品升温至 750℃ 都未出现其他放热峰或吸热峰. 这说明样品分解成 Cr 和 Ce 的氧化物后,未有晶相转变或固相反应等其他热化学物理过程的发生. 从 XRD 实验结果(图 4a)也可以看出,谱图上仅出现 Cr₂O₃ 和 CeO₂ 及 γ-Al₂O₃ 的弥散衍射峰. 说明以本实验的制备方法得到的 Cr-Ce/γ-Al₂O₃ 催化剂没有发生固相反应生成复合氧化物或盐类,仅各自以自身较稳定的氧化物,以高分散的微晶状态存在.

结合前述的不同 Cr-Ce 样品的氧化活性,可以认为,在 A 系列样品中,Cr、Ce 二组份虽未结

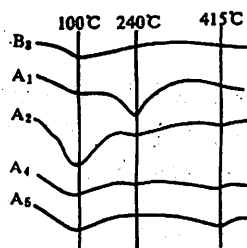


图 3 各样品先驱体的差热谱

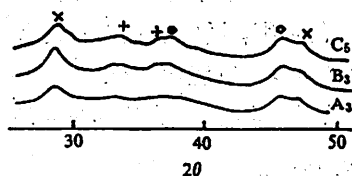
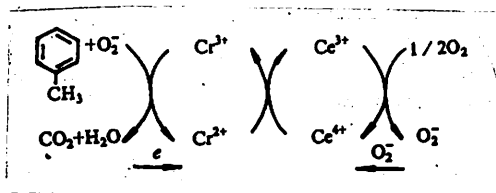


图 4 催化剂样品 X 射线衍射谱

x CeO₂ + Cr₂O₃ o γ-MnO₂

合成复合氧化物等形式,以独立的氧化物状态存在,但是它们之间仍存在着相互作用,使得 $\frac{Cr}{Cr + Ce}$ 在 0.5-0.7 时具有对甲苯氧化最佳活性. 在催化剂制备过程中,将硝酸铬和亚硝酸铈混合溶液等量地浸渍于氧化铝载体上,让 Cr、Ce 能得到充分地混合,有较好的分散度,以保证 Cr 和 Ce 之间的协同作用有一合适的空间位形. Cr₂O₃ 具有较高的烃类活化性能,而 CeO₂ 具有较强的储氧、促进晶格氧活动的性能^[2]. 在甲苯氧化过程中,可能甲苯被 Cr³⁺ 吸附中心吸附并被活化氧化,而 Ce⁴⁺ 使晶格氧转移将还原了的铬氧化,铈本身又从气相中吸附氧并活化,使得氧缺位又得以补充. 从而使反应不断进行. 这样的 Mars-Van, Krevelen 反应机理可由下图示意描述.



3.2 掺钾对铬-铈催化剂活性的影响

B 系列样品的甲苯氧化活性对反应温度的曲线示于图 5. 由图可知,掺入不同含钾量的催化剂,其氧化性能都有不同程度地改善. 图 6 为在甲苯氧化活性分别为 50%、80% 时的反应温度对钾含量的曲线. 由图可见,起初甲苯的氧化活性随着钾含量的增加而明显提高. 当钾含量在 0.05-0.10 时活性最佳. 与未掺入钾的比较,在 50%、80% 转化率时,反应温度都降低了 50℃ 左右. M. Misono 等人对有机物催化氧化的研究认为,催化剂的碱性对其氧化活性起到重要作用. 张岳等人研究了碱金属对氧化锰催化剂活性的影响^[3],得到的结果是钾的掺入抑制了氧化锰对烃类氧化的活性,认为是生成活性较差的锰酸盐所致. 我们的结果是适量钾的掺入能够较大地提高 Cr-Ce 体系样品的甲苯氧化活性. 这可能由于钾的存在有利于电子传递,从而促进 Cr-Ce 体系中甲苯氧化的 Mars-Van Krevelen 机制的进行. 同时钾的存在没有影响 Cr、Ce 氧化物的晶体结构. 在 XRD 谱图上仍显示为 Cr₂O₃ 和 CeO₂ 晶相. 而对于氧化锰催化剂, K/Mn(原子比)在 0.08 时就产生了抑制烃类氧化的 KMn₃O₁₆ 晶相. 在 0.12 时 KMn₃O₁₆ 变

为主要晶相^[3]。值得注意的是所有掺钾的 Cr-Ce 样品均使反应的“负温度效应”现象消失。

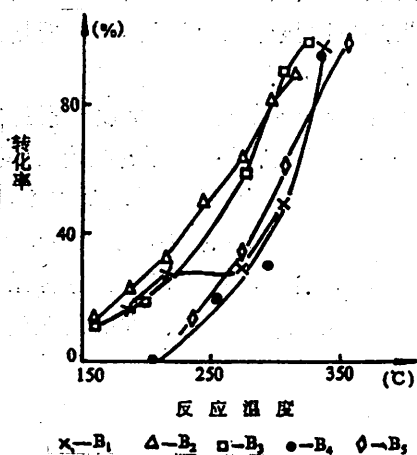


图 5 B 系列样品活性曲线

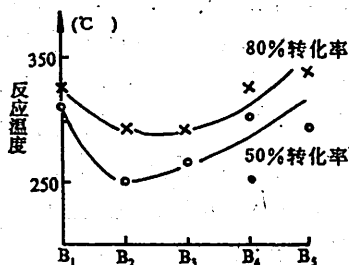


图 6 相同转化率时反应温度随钇含量的变化

3.3 掺碱(土)金属对铬-铈催化剂活性的影响

C 系列样品的甲苯氧化活性与反应温度关系曲线示于图 7。由图可见,碱(土)元素的掺入都可不同程度地改善 Cr-Ce 体系的氧化活性。其中以掺钾的效果最佳。将掺碱(土)元素样品的氧化活性与碱(土)元素样品的第一电离势关联示于图 8。可以发现,随着掺入元素的碱性增强,即第一电离势的降低,它们的氧化活性提高,并基本上接近线性增加。

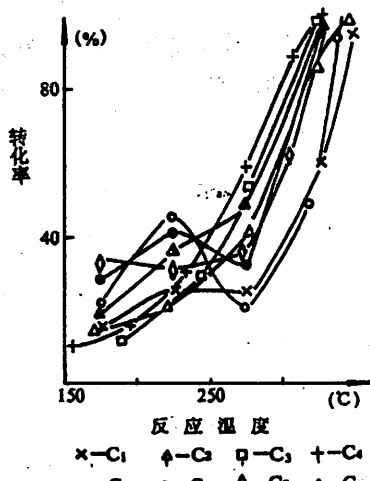


图 7 C 系列样品活性曲线

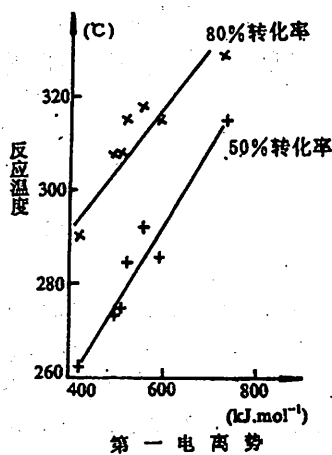


图 8 掺碱(土)样品的催化活性和碱(土)元素第一电离势的关系

在图 3a 中 B₃ 前驱体的 DTA 谱线上,除了 100℃左右的脱水峰外,无其他吸热放热峰存在。在图 4b 中 B₃ 样品的 XRD 谱线上,只有 Cr₂O₃, CeO₂ 和 γ-Al₂O₃ 的谱峰。其他掺碱(土)元素

样品的结果均与 B₃ 类似(例如图 4c 的 C₅ 样品)。这说明掺入的碱(土)元素未与 Cr-Ce 体系样品发生明显的热化学物理过程和晶体结构的改变。其原因很可能是由于掺入的碱(土)元素含量较低,对催化剂的作用不强烈,未对催化剂的整个体相产生明显作用,仅仅作用于催化剂的表相。因此,DTA 和 XRD 难以检测到碱(土)金属元素对表相的影响。

在甲苯完全氧化反应中,Cr-Ce 体系样品的氧化活性随着加入的碱(土)金属元素的碱性增加而增大,可能是较强的碱性元素更有利于促进电子的转移,有利于对苯环的吸附、活化^[4],从而有利于加快甲苯的氧化。由 B 系列样品的氧化活性比较可知,钾的掺入量增加过多,反而对氧化活性的改善不明显。其原因可能是过多的钾元素掩盖了适中的酸中心,使 Mars-Van Krevelen 机制不易进行。也可能与 Cr、Ce 等生成活性较差的化合物。对于碱(土)金属元素的掺入从而改善 Cr-Ce/ γ -Al₂O₃ 催化剂活性的原因,以及在某些情况下将反应活性的负温度效应消除等,均有待于进一步深入研究。

4 结论

(1) Cr-Ce/ γ -Al₂O₃ 催化剂的甲苯氧化反应活性优于单组份的 Cr 或 Ce 氧化物催化剂。其中尤以 $\frac{\text{Cr}}{\text{Cr} + \text{Ce}}$ (原子比) = 0.5 - 0.7 时活性最佳。

(2) 钾的掺入改善了 Cr-Ce/ γ -Al₂O₃ 催化剂对甲苯氧化的反应活性,其中以 $\frac{\text{K}}{\text{Cr} + \text{Ce}}$ (原子比) = 0.05 - 0.10 时效果最显著。

(3) 不同碱(土)金属元素的掺入均能对 Cr-Ce/ γ -Al₂O₃ 催化剂的甲苯氧化活性有所改善。氧化活性的提高与碱(土)金属元素的碱性成正变关系,即按 Mg、Ca、Sr、Li、Ba、Na、K 的碱性递增而增高。

(4) Cr-Ce/ γ -Al₂O₃ 催化剂中,Cr、Ce 之间存在协同作用,但未形成复合物,仍以各自的稳定的氧化物存在。碱(土)元素的掺入,也未显示出对其晶体结构的改变。

参 考 文 献

- [1] 山添昇,寺冈靖刚,触媒, 25(1983),No. 3, 196.
- [2] Misono, M. et al., J. Catal. 98(1986), 221.
- [3] 张岳、茅世林、胡克源,环境化学, 5(1986),No. 1, 1.
- [4] 千载虎、王恒煜、许昌凤,石油化工, 16(1987),No. 3, 264.

Effect of Alikali(Alikali Earth) Doping on the Catalytic Activity of Cr-Ce/ γ -Al₂O₃ in the Oxidation of Toluene

Shan Shaochun Cheng shaowei Fu Yilu

(Department of Modern Chemistry)

Abstract

The activity for the complete oxidation of toluene on Cr₂O₃-CeO₂/ γ -Al₂O₃ binary oxide catalyst and the effect of alkali or alkali-earth elements doping on the catalyst have been studied. It is shown that the sample with the composition of Cr : (Cr+Ce) (atomic ratio) = 0.5—0.7 possesses relatively higher activity than any others; the behaviors of Cr-Ce oxide catalyst for the oxidation of toluene are improved with alkali or alkali-earth elements doping, and the stronger the basicity, the higher the activity. The sample with the highest activity is one with the composition of K : (Cr+Ce) (atomic ratio) = 0.05—0.1.

Key words: oxide catalysts, toluene oxidation, catalytic activity

量子能谱的非线性解法

朱栋培 石名俊 陈银华

(近代物理系)

摘 要

本文建议一个求解量子系统束缚态能量本征值的新方法. 通过一个积分变换, Schrödinger 方程可转变为非线性的 Riccati 方程, 求解它相当于对位势作带参数(能量)的反 Miura 变换. 借助于节点定理我们可以绕过特殊函数而迅捷得到全部能级, 从而使量子能谱的求解过程大为简化.

关键词: 量子能谱, 束缚态, Riccati 方程

中图法分类号: O431

量子力学中一大类问题涉及到束缚态, 而描述束缚态的最基本特征是能量. 在求解有关的 Schrödinger 方程以确定能量本征值的过程中, 常常遇到特殊函数. 一般用级数解法, 利用波函数标准条件使级数截断以确定相应的量子数. 这一方法往往很麻烦. 曾经发展了很多种求解能谱的方法, 如因子化方法、群论方法、谱生成代数法及变分方法等, 都各有短长. 这里我们提出一个新方法, 其特点是通过一个积分变换把 Schrödinger 方程转变为非线性的 Riccati 方程, 或含参数的 Miura 变换, 参数即为能量本征值. 反解这个 Miura 变换, 就可以定下能量本征值, 从而也可定出相应的波函数. 由于束缚态波函数有相当好的性质如节点定理, 上述 Riccati 方程比较容易求解, 这样我们就可以避免与特殊函数打交道而快捷得到能谱.

考虑一个质量为 μ 的粒子在一维束缚位势 $V(x)$ 中运动, 相应的 Schrödinger 方程为

$$\psi''(x) + (e - v(x))\psi(x) = 0 \quad (1)$$

这里 $e = 2\mu E/\hbar^2$, E 为束缚态能量, $v(x) = 2\mu V(x)/\hbar^2$. 现在作一个积分变换

$$\psi(x) = N \exp \int_a^x Z(t) dt \quad (2)$$

其中 a, N 皆为常数. 上式也可反写出来, 引入 Z 函数

$$Z(x) = d(\ln \psi(x))/dx = \psi'(x)/\psi(x) \quad (3)$$

则函数 Z 满足下面的非线性方程

$$Z'(x) + Z^2(x) = v(x) - \epsilon \quad (4)$$

这是一个带参数 ϵ 的 Riccati 方程, 或者是一个带参数的 Miura 变换. 求解束缚态能谱的问题转化为求解带待定本征值的 Riccati 方程, 或反解含参数的 Miura 变换问题.

要使非线性方程(4)有确定的解, 需要一定的条件. 波函数要满足连续等标准条件, 且一维束缚态波函数可以选为实的, 因此 $Z(x)$ 可是一个实的连续函数. 束缚态的边界条件要求波函数在无限处消失, 故而有

$$Z(x) \rightarrow -\infty \quad (|x| \rightarrow \infty) \quad (5)$$

这对 Z 函数的形式, 特别是领头项的符号给了很强的限制. 再有, 对束缚态有著名的节点定理^[1,2]. 对一维问题而言, 在基本区域内, 基态无节点, 第 n 个激发态有 n 个节点. 这样, 第 n 个激发态的波函数形式上可能写成下面的样子

$$\psi(x) = \psi_0(x) \prod_{i=1}^n (x - x_i) \quad (6)$$

其中 $\psi_0(x)$ 在基本区域内无节点, 于是相应的 Z 函数的形式为

$$Z(x) = Z_0(x) + \sum_{i=1}^n 1/(x - x_i) \quad (7)$$

当然, 如果位势本身有奇点, 则波函数. 不因而 Z 函数在奇点处的行为可能需要单独讨论.

把形如(7)的 Z 函数代入 Riccati 方程, 根据势 $v(x)$ 的形式选择适当的 $Z_0(x)$, 比较独立函数项的系数可以得到一组代数方程, 考虑到 Z 函数的一些限制, 求解此代数方程就可以得到系统的能量本征值. 下面我们用几个常见的量子系统来说明这方法的优越.

例 1 一维谐振子

一维无限谐振子的位势为

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2$$

$$\text{或} \quad v(x) = 2\mu V(x)/\hbar^2 = \alpha^4 x^2, \alpha \equiv (\mu\omega/\hbar)^{1/2} \quad (8)$$

相应的 Riccati 方程是

$$Z' + Z^2 = \alpha^4 x^2 - \epsilon \quad (9)$$

我们取 Z 函数为

$$Z(x) = Ax + \sum_{i=1}^n 1/(x - x_i) \quad (10)$$

代入方程(a)得

$$A + A^2 x^2 + 2nA + \sum_{i=1}^n 2[Ax_i + \sum_{j \neq i} 1/(x_i - x_j)]/(x - x_i) = \alpha^4 x^2 - \epsilon$$

比较同类项前的系数, 我们得关系

$$\begin{cases} \epsilon = -(2n + 1)A \\ A^2 = \alpha^4 \\ Ax_i + \sum_{j \neq i} 1/(x_i - x_j) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{cases} \quad (11)$$

由于条件(5), 我们知道 A 必须小于零, 故得

$$A = -\alpha^2$$

$$\varepsilon = \varepsilon_n = (2n+1)\alpha^2$$

由此我们可得一维无限谐振子的能量本征值为

$$E_n = \hbar^2 \varepsilon_n / 2\mu = (n+1/2)\hbar\omega, \quad n=0,1,2,\dots \quad (12)$$

方程组(11)中第三个方程是关于节点位置的,由此可解出节点坐标 x_i , 然后得到 Z 函数, 再从(2)积分而得相应能级的波函数.

例 2 三维各向同性谐振子

位势为

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \quad (13)$$

此时描写粒子运动的 Schrödinger 方程可以分离变量. 设波函数为

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)/r \quad (14)$$

则等效一维运动波函数 $\chi(r)$ 满足下面的定态方程

$$H_l \chi(r) = E \chi(r) \quad (15)$$

而等效哈密顿算子 H_l 有下面的形式

$$H_l = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (16)$$

同样对 χ 作积分变换, 我们得到相应的 Riccati 方程

$$Z' + Z^2 = \alpha^2 r^2 + l(l+1)/r^2 - \varepsilon, \quad \alpha = (\mu\omega/\hbar)^{1/2} \quad (17)$$

在球坐标下, 粒子在此处是作的一维的半无限的运动, $0 \leq r < \infty$, 但要加上离心势. 离心势给方程(17)的求解带来些麻烦. 为此, 我们注意到, 等效位势是 r 的偶函数, 我们可以扩充 r 的范围, $-\infty < r < \infty$, 这时, 原来第 n_r 个激发态有 n_r 个正的节点 r_i ($i=1, 2, \dots, n_r$), 经扩充后对称地增加了 n_r 个负节点 $r_{n_r+j} = -r_j$ ($i=1, 2, \dots, n_r$); 亦即共有 $2n_r$ 个非零节点, 它们满足关系

$$\sum_{i=1}^{2n_r} (1/r_i) = 0 \quad (18)$$

现在我们设

$$Z(r) = Br + c/r + \sum_{i=1}^{2n_r} 1/(r - r_i) \quad (19)$$

代入 Riccati 方程(17), 比较各幂次项的系数, 利用性质(18)我们得关系

$$\begin{cases} c^2 - c = l(l+1) \\ \varepsilon = -(4n_r + 2c + 1)B \\ B^2 = \alpha^4 \\ Br_i + c/r_i + \sum_{j \neq i} 1/(r_i - r_j) = 0 \end{cases} \quad (20)$$

波函数在原点的有限性要求 c 为正数, 而无限远处的行为限制 B 必为负数, 于是得

$$c = l + 1$$

$$B = -\alpha^2$$

$$\varepsilon = (4n_r + 2l + 3)\alpha^2 \quad (21)$$

最后我们得三维各向同性谐振子系统的能级

$$E_{n,l} = \hbar^2 e / 2\mu = (2n_r + l + 3/2)\hbar\omega, \quad n_r, l = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

例 3 氢原子

把角度部分分离变量后, 与一维运动波函数 $\chi(r)$ 相应的等效哈氏量中的氢原子位势为

$$V(r) = -e^2/r + \hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2 \quad (23)$$

这样对应的 Riccati 方程取下面的形式

$$Z' + Z^2 = -\sigma/r + l(l+1)/r^2 - \varepsilon \quad (24)$$

$$\sigma \equiv 2\mu e^2/\hbar^2$$

我们不妨设 Z 为

$$Z(r) = D + c/r + \sum_{i=1}^n 1/(r - r_i) \quad (25)$$

代入方程(24), 比较系数得代数关系

$$\begin{cases} c^2 - c = l(l+1) \\ \varepsilon = -D^2 \\ 2Dc - 2c \sum_i 1/r_i = -\sigma \\ c/r_i + D + \sum_{j \neq i} 1/(r_i - r_j) = 0 \end{cases} \quad (26)$$

c 必须为正而 D 当为非正, 于是从(26)可得下面的解

$$c = l + 1$$

$$D = -\sigma/2(c + n_r) = -\sigma/2(n_r + l + 1)$$

$$\varepsilon = -D^2 = -\sigma^2/4(n_r + l + 1)^2 \quad (27)$$

这样我们得到了氢原子的能级公式

$$E_{n,l} = \hbar^2 e / 2\mu = -\frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 / (n_r + l + 1)^2 \quad (28)$$

$$n_r, l = 0, 1, 2, \dots$$

$$\alpha \equiv e^2/\hbar c$$

例 4 修正普薛耳—特勒(Pöschl-Teller)势

虽说(7)式给出了 Z 函数的一般形式, 但对具体的问题, 可以选取 Z 的适当表达式以使问题的处理变得方便. 作为例子, 我们来讨论粒子在修正普薛耳—特勒势中的运动, 此时位势为^[3]

$$v(x) = -\alpha^2 \lambda(\lambda - 1)/\text{ch}^2 \alpha x, \quad \lambda > 1, \alpha > 0 \quad (29)$$

我们选取如下形式的 Z 函数

$$Z(x) = F \text{th} \alpha x + \alpha \sum_{i=1}^n \text{cth} \alpha(x - x_i) \quad (30)$$

这里节点部分用双曲余切函数表达. 在节点附近, $x \sim x_i$, $\alpha \text{cth} \alpha(x - x_i) \sim 1/(x - x_i)$, 是单极点形式, 确实可给出波函数的节点, 而这种形式的 Z 函数在这里就比较方便. 计算给出

$$Z' + Z^2 = F\alpha/\text{ch}^2 \alpha x - \alpha^2 \sum 1/\text{sh}^2 \alpha(x - x_i)$$

$$+ F^2 \text{th}^2 \alpha x + \alpha^2 \sum \text{cth}^2 \alpha(x - x_i) + 2F\alpha \text{th} \alpha x \sum \text{cth} \alpha(x - x_i)$$

$$+ \alpha^2 \sum_i \sum_{j \neq i} \text{cth}\alpha(x - x_i) \text{cth}\alpha(x - x_j) \quad (31)$$

利用公式

$$\begin{cases} \text{th}^2 \alpha x = 1 - 1/\text{ch}^2 \alpha x \\ \text{cth}^2 \alpha x = 1 + 1/\text{sh}^2 \alpha x \\ \text{th}\alpha x \text{cth}\alpha(x - x_i) = 1 + \text{th}\alpha x_i \text{cth}\alpha(x - x_i) - \text{th}\alpha x \text{th}\alpha x_i \\ \text{cth}\alpha(x - x_i) \text{cth}\alpha(x - x_j) = 1 + \text{cth}\alpha(x_i - x_j) [\text{cth}\alpha(x - x_i) - \text{cth}\alpha(x - x_j)] \end{cases} \quad (32)$$

将 $Z^1 + Z^2$ 中各项化简, 代入 Riccati 方程, 并利用势的对称性知节点位置之和为零,

$$\sum_{i=1}^n \text{th}\alpha x_i = 0 \quad (33)$$

可得

$$\begin{aligned} & F^2 + \alpha^2 n + 2nFa + \alpha^2 n(n-1) + (Fa - F^2)/\text{ch}^2 \alpha x \\ & + \sum_i (2aF \text{th}\alpha x_i + 2\alpha^2 \sum_{j \neq i} \text{cth}\alpha(x_i - x_j)) \text{cth}\alpha(x - x_i) \\ & = -\alpha^2 \lambda(\lambda - 1)/\text{ch}^2 \alpha x - \varepsilon \end{aligned} \quad (34)$$

由此导出代数关系

$$\begin{cases} \varepsilon = -(F + n\alpha)^2 \\ Fa - F^2 = -\alpha^2 \lambda(\lambda - 1) \\ 2aF \text{th}\alpha x_i + 2\alpha^2 \sum_{j \neq i} \text{cth}\alpha(x_i - x_j) = 0, i = 1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (35)$$

由第二式及 F 必须为负以满足束缚态边界条件而得

$$F = -\alpha(\lambda - 1) \quad (36)$$

由此

$$\varepsilon = -\alpha^2(\lambda - 1 - n)^2 \quad (37)$$

这样我们得到粒子在修正普薛耳-特勒势中作束缚运动时的能量本征值为

$$E_n = \hbar^2 \varepsilon / 2\mu = -(\hbar^2 \alpha^2 / 2\mu)(\lambda - 1 - n)^2, n = 0, 1, 2, \dots \quad (38)$$

这一寻求束缚态能级的方法对其它许多位势也都适用. 单从上面列举的几个例子可以看出, 我们建议的办法在求能谱时相当简捷, 其原因可能是我们是同位势直接打交道, 把势作了特别的分解(参数反 Miura 变换)以确定能量本征值, 从而不涉及波函数的显示表达式, 这样就避免了特殊函数的纠缠. 当然这反过来也是这一方法的局限性, 即由于关于节点位置的代数方程不易求解, 它不易给出一般能级的波函数的表达式(基态和低激发态的波函数是容易求得的). 这一方法的另一局限是它所适用的位势也有一定限制. 有的位势虽然形式简单(如重力位势 gx), 却也不好求解, 因此希望仍能改进以扩大适用范围. 当然, 向高维方向的发展也是一个拓宽的方向.

参 考 文 献

- [1] R. 柯朗、D. 希伯特著, 钱敏、郭敦仁译, 数学物理方法 I, 科学出版社, 1958, 346.
[2] A. 梅西亚著, 苏汝铿、汤家镛译, 量子力学, 科学出版社, 1986, 113.
[3] S. 福里格著, 宋孝同、高琴、梁仙翠译, 实用量子力学, 人民教育出版社, 1982, 97.

A Non-Linear Approach to Determining Quantum Energy Spectrum

Zhu Dongpei Shi Mingjun Chen Yinhua

(Department of Modern Physics)

Abstract

A new method of finding the energy level of quantum bound states is proposed. By an integral transformation the Schrodinger equation is changed to Riccati equation. Solving this equation is equivalent to making a parametrized inverse Miura transformation to potential. This can be done easily with the help of node theorem.

Key words: quantum energy spectrum, bound state, Riccati equation

Reflection and Transmission of Elastic Waves at the Interface of Two Fluid-Saturated Porous Media

Wu Kunyu

(*Department of Radio and Electronics*)

Xue Qiang Laszlo Adler

(*Ohio State University of U. S. A.*)

Abstract

Biot's theory is used to investigate the reflection and transmission of elastic waves at the interface of two fluid-saturated porous media. The general cases of mode conversion are considered; an obliquely incident elastic wave which may be either a fast or slow compressional wave or a shear wave gives rise to reflected and transmitted waves of all three types. The energy reflection and transmission coefficients as a function of incident angle are obtained for a rather general set of boundary conditions. An example of the numerical solution is presented.

Key words: elastic wave, reflection and transmission, fluid-saturated porous media

1 Introduction

The investigation of the interaction of elastic waves with boundaries of fluid-saturated media is important not only from the point of view of applications in seismology and underwater acoustics, but also at the theoretical level, since new physical phenomena are observed in contrast with ordinary elastic medium as a result of fluid filtration through the pore channels^[1-4].

Employing Biot's theory, several authors^[5-7] have discussed the theory of reflection and transmission of elastic waves at an interface of a porous medium exhibiting fast and slow compressional waves for certain special cases. In the present analysis, we developed a numerical procedure to deal with the problem of reflection and transmission of elastic waves at an interface of two fluid-saturated porous media for the case of general boundary condition and oblique incidence.

2 Theory

The equations describing the propagation of elastic wave in a homogeneous, dissipationless and fluid-saturated porous solid in the framework of Biot theory have the form

$$\rho_{11} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} + \rho_{12} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} = P \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + Q \nabla (\nabla \cdot \mathbf{U}) - N \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) \quad (1)$$

$$\rho_{22} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} + \rho_{12} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = R \nabla (\nabla \cdot \mathbf{U}) + Q \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (2)$$

where ρ_{11} and ρ_{22} are the effective densities of the solid and fluid phases, ρ_{12} is the coefficient of mass coupling between the solid and fluid phases, \mathbf{u} and \mathbf{U} are the displacement vectors of the solid and fluid phases, P , Q and R are elastic constants which can be related to ϕ (porosity), K_s (bulk modulus of solid), K_f (bulk modulus of fluid), N (shear modulus), and K_0 (bulk modulus of skeleton) for a fluid-saturated solid^[8].

We characterize the acoustic fields in a fluid-saturated porous solid by the scalar potentials φ_+ , φ_- for fast and slow compressional waves and vector potential ψ for shear wave. The displacement vectors of the solid and the fluid phases are:

$$\mathbf{u} = \nabla \varphi_+ + \nabla \varphi_- + \nabla \times \psi \quad (3)$$

$$\mathbf{U} = -G_+ \nabla \varphi_+ - G_- \nabla \varphi_- + \frac{\alpha - 1}{\alpha} \nabla \times \psi$$

$$G_{\pm} = (V_{\pm}^2 \rho_{11} - P) / (V_{\pm}^2 \rho_{12} - Q) \quad (4)$$

where α is the tortuosity, V_{\pm} are the phase velocities of fast and slow compressional waves.

Let the interface of two fluid-saturated porous media be given by the $z=0$ plane in a rectangular coordinate system. Consider a plane elastic wave incident from medium-I onto the interface at an arbitrary incident angle with propagation vector in the zx plane. All of the physical parameters pertinent to the medium I are distinguished from those of medium I by a prime.

Based on the discussions in Ref. ^[8-9], the boundary conditions that must be satisfied at the interface can be written as follows:

1) Continuity of the total normal stress

$$(P - 2N + Q) \frac{\partial u_z}{\partial z} + (P + Q) \frac{\partial u_x}{\partial z} + (Q + R) (\nabla \cdot \mathbf{U}) = (P' - 2N' + Q') \frac{\partial u'_z}{\partial z} + (P' + Q') \frac{\partial u'_x}{\partial z} + (Q' + R') (\nabla \cdot \mathbf{U}') \quad (5)$$

2) Continuity of the tangential stress

$$N \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) = N' \left(\frac{\partial u'_x}{\partial z} + \frac{\partial u'_z}{\partial x} \right) \quad (6)$$

3) Continuity of the normal displacement of solid skeleton

$$u_x = u'_x \quad (7)$$

4) Continuity of the tangential displacement of solid skeleton

$$u_z = u'_z \quad (8)$$

5) Continuity of the normal components of the bulk-average velocity of the fluid relative to the solid skeleton

$$\varphi(\dot{U}_z - \dot{u}_z) = \varphi'(\dot{U}'_z - \dot{u}'_z) \quad (9)$$

where the dot over the letters indicates the derivative with respect to time.

6) Proportionality of the pressure drop in the interstitial fluid across the interface to the normal component of the relative velocity

$$(1/\varphi)[Q(\nabla \cdot u) + R(\nabla \cdot U)] - (1/\varphi')[Q'(\nabla \cdot u') + R'(\nabla \cdot U')] = i\omega\varphi T(U_z - u_z) \quad (10)$$

where T is a kind of surface flow impedance, ω is the angular frequency.

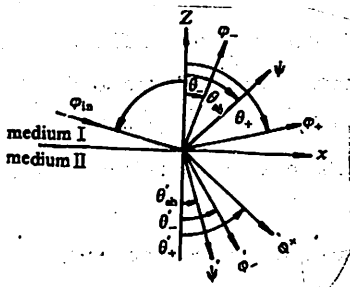


Fig. 1 Incident, reflected and transmitted potential functions

The Poynting energy flux vector for the elastic waves in a fluid-saturated porous medium has been derived from the fundamental equation of Biot's theory in our recent article^[10]:

$$P = -\dot{u} \cdot T - \dot{U}S \quad (11)$$

where T is the stress tensor in the skeleton, S is the diagonal stress in the interstitial fluid. Substituting the components of u , U , T and S into Eq. (11), we obtain the expressions of the z component of Poynting vector for fast and slow compressional and shear waves in the fluid-saturated porous solid:

$$P_{z\pm} = [(2Q - RG_{\pm})G_{\pm} - P](\omega^4/V_{\pm}^3) |\varphi_{\pm}|^2$$

$$P_{z\alpha} = N(\omega^4/V_{\alpha}^3) |\psi|^2 \quad (12)$$

3 Computational Results and Discussion

When the initial wave is incident from medium I onto the interface between two fluid-saturated porous media, three reflected and three transmitted bulk waves will be generated (Fig. 1). The porous materials chosen in this calculation are a water-saturated fused-glass-bead solid and a water-saturated fused-lead-bead solid. Their elastic parameters (taken from Ref. [6]) are listed in Table 1.

Table 1 Elastic parameters of porous media

	ρ_f kg/m ³	K_f 10 ¹⁰ N/m ²	φ	a	K_s 10 ¹⁰ N/m ²	ρ_s kg/m ³	K_b 10 ¹⁰ N/m ²	N 10 ¹⁰ N/m ²	V_+ m/s	V_- m/s	V_{α} m/s
porous fused glass beads (medium I)	1000	2.25	0.38	1.79	49.9	2480	5.17	2.8	2657	936	1281
porous fused lead beads (medium I)	1000	2.25	0.30	2.16	36.6	11400	7.1	1.42	1363	749	417

3.1 Fast Compressional Wave Incident

In this case, the displacement potential functions for the incident, reflected and transmitted waves can be written in the form

$$\varphi_+ = (e^{-iy_+z} + Ae^{iy_+z})e^{i(\sigma x - \omega t)}$$

$$\varphi_- = Be^{iy_-z}e^{i(\sigma x - \omega t)}$$

$$\psi = Ce^{iy_{\alpha}z}e^{i(\sigma x - \omega t)}$$

$$\varphi'_+ = A'e^{-iy'_+z}e^{i(\sigma x - \omega t)} \quad (13)$$

$$\varphi'_- = B'e^{-iy'_-z}e^{i(\sigma x - \omega t)}$$

$$\psi' = C'e^{-iy'_{\alpha}z}e^{i(\sigma x - \omega t)}$$

where the amplitude of the incident wave is assumed to equal unity; A, B, C are the amplitudes of the reflected waves; A', B', C' are the amplitudes of the transmitted waves, and

$$\begin{aligned}
 \sigma^2 + \gamma_{\pm}^2 &= \omega^2/V_{\pm}^2 \\
 \gamma_{\pm} &= (\omega/V_{\pm})\cos\theta_{\pm} \\
 \sigma^2 + \gamma_{\pm a}^2 &= \omega^2/V_{\pm a}^2 \\
 \gamma_{\pm a} &= (\omega/V_{\pm a})\cos\theta_{\pm a} \\
 \sigma'^2 + \gamma'_{\pm}{}^2 &= \omega^2/V'_{\pm}{}^2 \\
 \gamma'_{\pm} &= (\omega/V'_{\pm})\cos\theta'_{\pm} \\
 \sigma^2 + \gamma'_{\pm a}{}^2 &= \omega^2/V'_{\pm a}{}^2 \\
 \gamma'_{\pm a} &= (\omega/V'_{\pm a})\cos\theta'_{\pm a} \\
 \sigma &= (\omega/V_{\pm})\sin\theta_{\pm} = (\omega/V_{\pm a})\sin\theta_{\pm a} = (\omega/V'_{\pm})\sin\theta'_{\pm} = (\omega/V'_{\pm a})\sin\theta'_{\pm a}
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

For the case of arbitrary surface flow impedance, insertion of Eq. (13) in Eqs. (3-4) and Eqs. (5-10) yields a set of boundary value equations which are solved directly for reflection coefficients A, B, C and transmission coefficients A', B', C' of the potential functions. Using Eq. 12, we can convert A, B, C , etc into the energy reflection and transmission coefficients by the following formulas:

$$\begin{aligned}
 R_+ &= A^2 \\
 R_- &= B^2[(P - 2QG_- + RG_-^2)\gamma_- V_{\pm}^2]/[(P - 2QG_+ + RG_+^2)\gamma_+ V_{\pm}^2] \\
 R_{\pm a} &= C^2 N \gamma_{\pm a} V_{\pm a}^2 / [(P - 2QG_+ + RG_+^2)\gamma_+ V_{\pm a}^2] \\
 T_+ &= A'^2[(P' - 2Q'G'_+ + R'G'^2_+)\gamma'_+ V'^2_{\pm}]/[(P - 2QG_+ + RG_+^2)\gamma_+ V'^2_{\pm}] \\
 T_- &= B'^2[(P' - 2Q'G'_- + R'G'^2_-)\gamma'_- V'^2_{\pm}]/[(P - 2QG_+ + RG_+^2)\gamma_+ V'^2_{\pm}] \\
 T_{\pm a} &= C'^2 N' \gamma'_{\pm a} V'^2_{\pm a} / [(P - 2QG_+ + RG_+^2)\gamma_+ V'^2_{\pm}]
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

In Figs. 2-3 we show the reflection and transmission coefficients for the open-pore (solid lines) and sealed-pore (dashed lines) boundary conditions. It should be emphasized that the energy reflection and transmission behaviors of the fast compressional and shear waves have almost no difference between the cases of $T=0$ and $T=\infty$. The energy reflection coefficient of the slow compressional wave for $T=0$ is little greater than that for $T=\infty$.

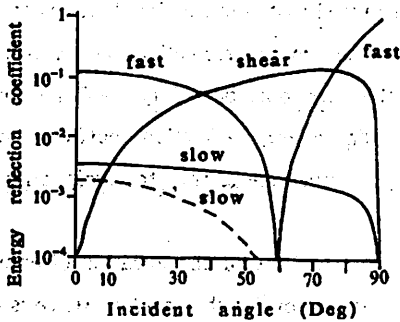


Fig. 2 Energy reflection coefficients of fast and slow compressional and shear waves for a fast compressional wave incident from medium I onto the interface with open-pores ($T=0$, by solid lines) and sealed-pores ($T=\infty$, by dashed lines).

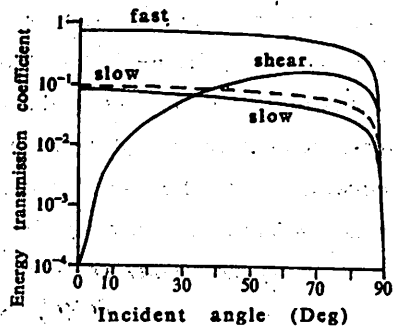


Fig. 3 Energy transmission coefficients of fast and slow compressional and shear waves for a fast compressional wave incident from medium I onto the interface with open-pores ($T=0$, by solid lines) and sealed-pores ($T=\infty$, by dashed lines).

3.2 Slow Compressional Wave Incidence

In this case there exist three critical angles, $\theta_{cr11} = \arcsin V_- / V_+ = 20.6^\circ$, $\theta_{cr12} = \arcsin V_- / V'_+ = 43.34^\circ$ and $\theta_{cr13} = \arcsin V_- / V_{s1} = 46.93^\circ$, for which the reflected fast compressional, transmitted fast compressional and reflected shear waves become evanescent in the z direction, respectively (Figs. 4—5). For the open-pore boundary condition, the energy reflection and transmission coefficients for slow compressional waves are greater than those for fast compressional and shear waves. For the sealed-pore boundary condition, most of the energy in the reflected and transmitted acoustic fields is carried by the reflected slow compressional wave and the transmitted shear wave, and the reflected fast compressional and shear modes as well as the transmitted fast and slow compressional modes are very weak.

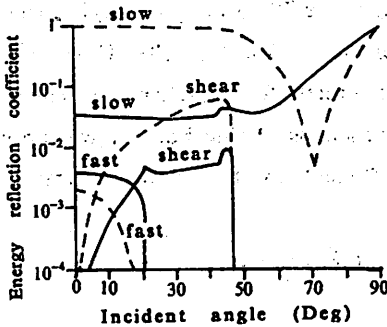


Fig. 4 Energy reflection coefficients of fast and slow compressional and shear waves for a slow compressional wave incident from medium I onto the interface with open-pores ($T=0$, by solid lines) and sealed-pores ($T=\infty$, by dashed lines).

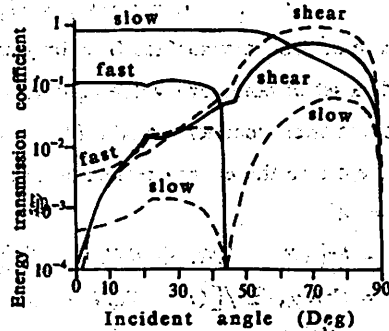


Fig. 5 Energy transmission coefficients of fast and slow compressional and shear waves for a slow compressional wave incident from medium I onto the interface with open-pores ($T=0$, by solid lines) and sealed-pores ($T=\infty$, by dashed lines).

3.3 Shear Wave Incidence

In this case there exist two critical angles, $\theta_{cr21} = \arcsin V_{s1} / V_+ = 28.8^\circ$ and $\theta_{cr22} = \arcsin V_{s1} / V'_+ = 69.0^\circ$, for which the reflected fast compressional and transmitted fast compressional waves are parallel to the boundary (Figs. 6—7). As shown in these figures, the energy reflection and transmission characteristics of the fast compressional and shear waves for the open-pore boundary condition are basically the same as those for sealed-pore boundary condition. The energy reflection coefficient of the slow compressional wave for $T=0$ is less than that for $T=\infty$, while the energy transmission coefficient for the $T=0$ is greater than that for the $T=\infty$.

To verify the validity of our computational program the law of conservation of energy is checked. It is proved that the normal component of the Poynting vector for the incident wave is equal to the sum of the normal real components of the Poynting vectors for the reflected and transmitted waves at each incident angle.

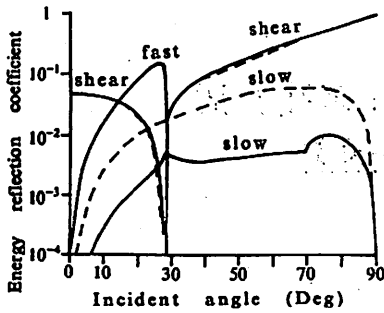


Fig. 6 Energy reflection coefficients of fast and slow compressional and shear waves for a shear wave incident from medium I onto the interface with open-pores ($T=0$, by solid lines) and sealed-pores ($T=\infty$, by dashed lines).

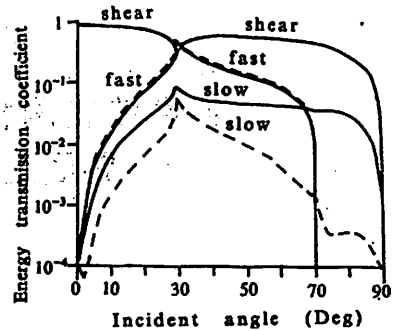


Fig. 7 Energy transmission coefficients of fast and slow compressional and shear waves for a shear wave incident from medium I onto the interface with open-pores ($T=0$, by solid lines) and sealed-pores ($T=\infty$, by dashed lines).

4 Conclusion

A numerical procedure has been developed to study reflection and transmission of elastic waves at the interface of two fluid-saturated porous solids. An example of numerical solution is presented. There are more complicated mode conversion and critical angle phenomena. The angular dependence of the reflection and transmission coefficients are in good agreement with physical considerations. The numerical results for the energy reflection and transmission coefficients are checked by agreement with the law of energy conservation. The numerical results indicate that the surface flow impedance has an effect only on the reflection and transmission coefficients concerned with slow compressional wave.

References

- [1] Biot M A, *J. Acoust. Soc. Am.*, 28(1956), 168, 179; 34(1962), 1254; *J. Appl. Phys.*, 33(1962), 1482.
- [2] Rosenbaun H, *Geophys.*, 39(1974), 14.
- [3] Plona T J, *Appl. Phys. Lett.*, 36(1980), 259.
- [4] Rasolofosaon P N, *J. Appl. Phys. Lett.*, 52(1988), 7.
- [5] Geerstma J and Smit D G, *Geophys.*, 26(1961), 169.
- [6] Deresiewicz H and Rice J T, *Bull. Seismol. Soc. Am.*, 50(1960), 599; 54(1964), 409.
- [7] Stoll R D and Kan T, *J. Acoust. Soc. Am.*, 70(1981), 149.
- [8] Feng S and Johnson D L, *J. Acoust. Soc. Am.*, 74(1983), 906.
- [9] Bourble T, Conssy O and Zinszner B, *Acoustics of Porous media*, Gulf Publishing Company, Houston, London, Paris, Tokyo, 1987, 245-248.
- [10] Kunyu Wu, Qiang Xue and Laszlo Adler, *J. Acoust. Soc. Am.*, 87(1990), 2349.

弹性波在两种液体饱和多孔介质 界面上的反射和透射

吴 昆 裕

(无线电电子学系)

薛 强 Laszlo Adler

(美国俄亥俄州立大学)

摘 要

Biot 理论用来研究弹性波在两种液体饱和多孔介质界面上的反射和透射,考虑到斜入射时模式转换的一般情况,对相当普遍的一组边界条件计算了能量反射和透射系数与入射角的关系. 给出了一个数值解的例子.

关键词: 弹性波, 反射和透射, 液体饱和多孔介质.

中图法分类号: O426.2

记忆合金螺旋弹簧的性能测试及设计方法

杨杰 吴月华 周榆生 张昌文 邬玉亭 邱自学

(精密机械与精密仪器系)

摘 要

用作者研制的记忆特性测试仪对 Cu-Zn-Al 形状记忆合金螺旋弹簧进行测试,以其结果为依据,介绍了螺旋弹簧的设计方法。同时还指出了在使用形状记忆合金元件时必须注意的若干问题。

关键词:形状记忆合金,记忆效应,记忆特性,应力应变曲线

中图法分类号:TH142.2,TH135.1

1 引言

形状记忆合金的基础研究工作日趋成熟。形状记忆效应最稳定、疲劳寿命最长的 Ti-Ni 合金已有不少成功的应用实例;价格低廉、记忆性能良好的铜基形状记忆合金,主要是 Cu-Zn-Al 合金应用已见报导;近年来开发成功的铁基形状记忆合金,主要是 Fe-Mn-Si 合金在应用领域也显露头角^[1]。

形状记忆合金是在应力作用下及在热循环过程中表现出它的形状记忆效应的。因此,温度、变形量、负载三者之间的定量关系是反映实用的形状记忆合金元件记忆特性的主要参数,也是应用设计中的主要依据。目前记忆特性的测试手段尚不成熟,国际上也还没有一个统一的标准。根据迄今世界上已获得形状记忆合金实用新型专利的情况看,90%以上的应用项目是将形状记忆合金做成螺旋弹簧。从实际应用开发考虑,我们研制了测定形状记忆合金螺旋弹簧记忆特性的测试仪,对 Cu-Zn-Al 合金做成的螺旋弹簧进行了测试,得到了满意的温度、变形量和负载的相关数据和相关曲线,进而运用这些数据和曲线,对实际应用中的螺旋弹簧进行设计。本文主要报告测试结果及设计方法,同时根据实践过程中遇到过的问题,提出在应用中必须引起重视的事项。

2 形状记忆合金元件的记忆特性测试

2.1 记忆特性测试仪

我们开发研制了形状记忆合金螺旋弹簧元件记忆特性测试仪 I 型。这个装置结构简单,

虽然全是手动,但操作方便,测试精度能满足使用要求,只是人工读数及读取实验数据的后续处理工作繁重.为此,又改进设计研制 I 型, I 型原理图如图 1 所示:除了采用各种传感元件,通过计算机自动采集数据外,将液体介质改为空气介质.空气介质的长处在于其热惯性比液

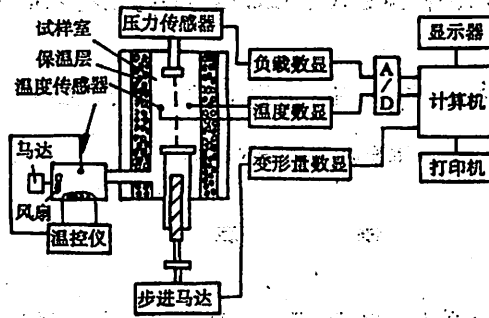


图 1 I 型测试仪原理图

体小,在反复不断的加热与冷却时,容易设定目标温度,且升降温达到目标温度时间短;另一个长处在于试样受流体局部温度扰动的影响要比液体介质小得多.当温度变化范围很大,如从负温到 200℃时,气体介质的优越性更加明显,因为在这样的温度区域内,液体介质的粘度将发生变化.两种介质的比较实验结果与分析参看文献[2],本仪器测试温度范围在室温~200℃.

2.2 测试内容

一般材料的材料特性表述通常只用应力和应变两个物理量,而形状记忆合金的材料特性表述除了应力和应变之外,还必须有温度这个物理量.实际应用中考察一种形状记忆合金元件的记忆特性时,主要看它的相变温度点,最大回复力和最大回复应变,使用设计时,还常常需要知道该元件的热应变系数、热应力系数及弹性系数等.

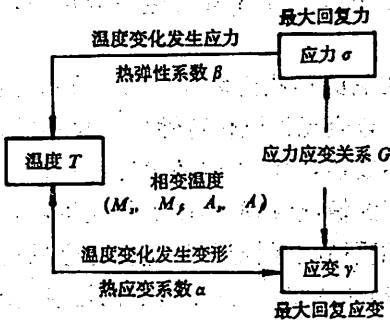


图 2 记忆特性各物理量关系

形状记忆合金记忆特性测试仪可以直接测得等温条件下的负载(回复力)和变形量关系、等负载条件下的变形量与温度关系、等变形量条件下的负载与温度关系.从这些定量关系出发,又可以获得若干间接性能值.

通过性能测试可以获得的物理量参数如图 2 所示.

$$\text{图中 } \beta = \left(\frac{\delta\sigma}{\delta T} \right)_r, G = \left(\frac{\delta\sigma}{\delta\gamma} \right)_r, \alpha = \left(\frac{\delta\gamma}{\delta T} \right)_\sigma$$

2.3 测试结果

测试对象为一组 Cu-26Zn-4Al wt% 形状记忆合金拉伸螺旋弹簧,弹簧的结构参数如表 1 所示.

我们测试了在等温状态下负载和变形量的相关数据和相关曲线,如图 3 所示.由此求得

一组等负载状态下变形量—温度、等变形量状态下的负载—温度的相关数据和相关曲线,分别图4和图5.

表1 弹簧结构参数

NO.	弹簧丝径 $d(\text{mm})$	弹簧中径 $D(\text{mm})$	有效圈数 n	室温自由长度 $S_0(\text{mm})$
1	2.5	13.0	12	34.0
2	3.0	15.0	9	29.3
3	3.0	20.0	5	17.5
4	3.0	20.0	7	23.3
5	3.0	20.0	9	28.5
6	3.0	11.5	5	17.0

测试精度:温度误差 $\sigma_T \leq 0.5^\circ\text{C}$, 变形量误差 $\sigma_L \leq 0.02\text{mm}$, 负载误差 $\sigma_F \leq 1.5\%$, 测试精度分析参看文献[3]. 有了上述测试数据和相关曲线, 为应用设计提供了依据.

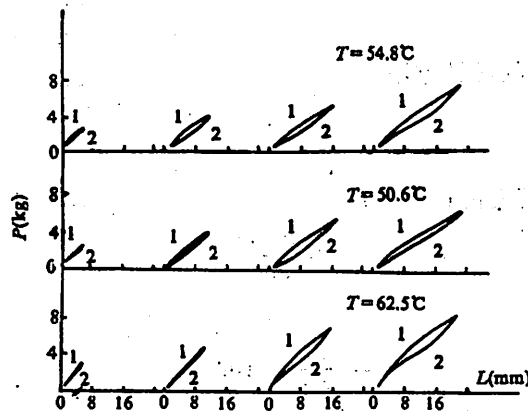


图3 等温状态下负载-变形量关系

1—加载 2—卸载

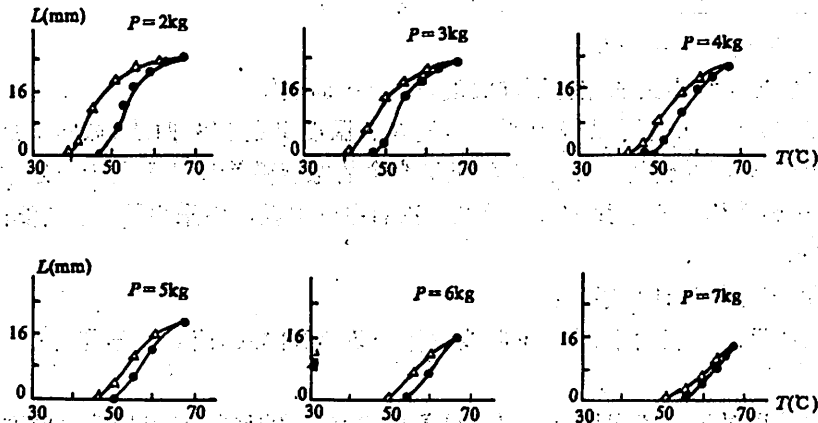


图4 等负载状态下变形量-温度关系

△降温 • 升温

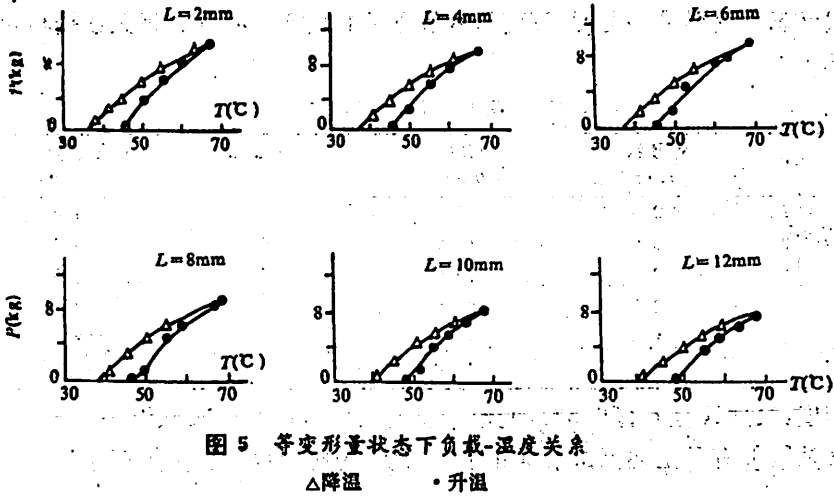


图 5 等变形量状态下负载-温度关系
 △降温 • 升温

3 形状记忆合金螺旋弹簧的设计方法

3.1 图解设计方法

根据弹簧剪应力和剪应变的计算公式^[4]

$$\tau = \frac{8PD}{\pi d^3} K \tag{1}$$

$$\gamma = \frac{dL}{\pi n D^2} \cdot 100\% \tag{2}$$

可以从 $P-L$ 测定值求得 $\tau-\gamma$ 值及其曲线图。式中 P 为负载, D 为弹簧中径, d 为弹簧丝径, L 为变形量, n 为弹簧有效卷数, K 为应力修正系数,

$$K = \frac{4C - 1}{4C - 4} + \frac{0.615}{C} \tag{3}$$

(3)式中 C 为弹簧指数, $C=D/d$ 。

图 6 是由实测结果得到的一组不同温度下的 $\tau-\gamma$ 曲线图。

弹性模量 $G=\tau/\gamma$ 于是可以得到弹性模量 G 和温度 T 的相关曲线,如图 7 所示。由图可知, G 是随 T 的变化而变化的。因此,形状记忆合金的螺旋弹簧设计不同于一般材料的弹簧设计,一般不通过弹性模量来求弹簧的各参数。我们在应用设计中采用了 $\tau-\gamma$ 曲线图解法,效果满意,比较方便。

$\tau-\gamma$ 曲线图解法的设计顺序是:

(I) 根据使用时负载大小,在 $\tau-\gamma$ 曲线中作一条负载曲线,使其和不同温度的 $\tau-\gamma$ 曲线分别相交。

(II) 根据使用时对形状记忆合金螺旋弹簧的动作行程要求,或根据使用时对温度范围的要求,在图中可选定高温和低温时的负载值和应变值,如图 P_H, P_L 和 γ_H, γ_L 。

(III) 根据使用时的其它要求,如空间大小等,设定弹簧指数 C 值,然后代入(1)式求得弹

簧丝径 d .

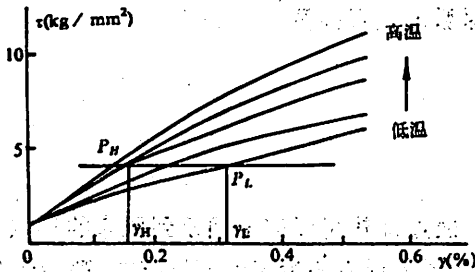


图 6 Cu-Zn-Al 合金不同温度下应力应变曲线

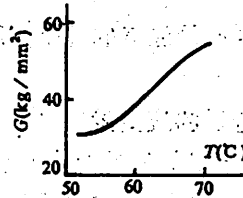


图 7 Cu-Zn-Al 合金弹性模量与温度关系

(IV) 将 d 值带入 (1) 式, 求出弹簧中径 D .

(V) 根据在图中得到的 γ_H, γ_L , 可以得到弹簧的变形量 L 值, 将 L 值代入 (2) 式, 即可求得有效卷数 n .

3.2 加偏置弹簧时的图解设计法

有形状记忆效应的合金弹簧, 在使用时经常加上偏置弹簧一起充当传感器+执行元件来实现双向动作. 使用方法常常如图 8 所示. 形状记忆合金弹簧是拉伸簧, 偏置簧是压缩簧, 室温状况下如图 8 所示. 温度上升到一定高度 ($>A_f$), 记忆合金簧由于形状记忆效应产生回复力, 使偏置簧压缩, 执行元件右移, 温度下降到一定温度之下, 记忆合金簧开始收缩, 执行元件左移.

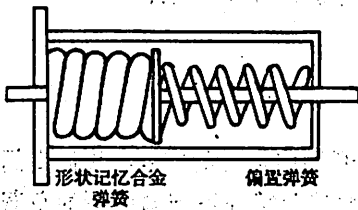


图 8 加偏置弹簧使用方法示意

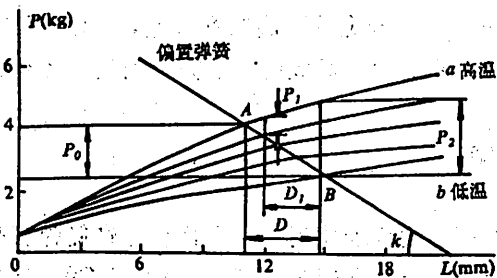


图 9 记忆合金簧和偏置簧组合的动作状态关系

加偏置弹簧时形状记忆合金弹簧的设计方法步骤与前面介绍的完全相同, 把恒负载水平直线改成可变负载倾斜直线即可.

加偏置弹簧后记忆合金的动作情况与整个执行元件的动作情况如图 9 所示.

a 为记忆合金高温时的负载特性曲线, b 为低温时特性曲线. 倾斜直线表示偏置弹簧的负载特性, 弹性系数为常数, 与 a, b 曲线交 A, B 两点, 分别为高低温时的两簧平衡状态位置.

如图所示, 在 B 点记忆合金簧的变位量为 15mm , 偏置簧的变位量为 6mm ; 在 A 点, 记忆合金簧的变位量为 11.2mm , 偏置簧为 9.8mm .

A, B 两点在 X 轴的差值应为记忆合金弹簧的动作行程. 无负载时, 记忆合金元件的最大输出力 $P_2 = 2.2\text{kg}$, 因有偏置簧存在, 偏置簧与行程 D 相对应所做功的力为 $P_0 = 1.7\text{kg}$, 所以记忆合金簧和偏置簧作为一个整体做功的力为 $P_1 = 0.5\text{kg}$, 执行元件的实际动作行程为 $D_1 =$

3mm.

使用中,可以根据不同的条件,选择不同弹性系数的偏置弹簧.

4 应用设计中必须注意的几个问题

(1) 控制合适的应变变量

所谓形状记忆效应即合金在受到塑性变形后,通过加热可以完全回复到原来的形状.但是并非给以任意的变形,加热后都能复原的.变形量过大或者不恰当的变形方式,都会使合金造成永久变形.根据大量文献报导,Cu-Zn-Al的最大可回复应变量为4%;实际使用中的允许应变变量受到多种因素制约,如需要合金元件动作次数多少,动作时负载大小,使用温度范围等,大致的允许应变变量值可以根据需要动作的次数来粗略确定,次数少时可取2~3%,次数多时取0.3%以下^[5].

(2) 控制温度范围

在有负载的条件下,形状记忆合金的逆相变开始温度 A_s 和终止温度 A_f 都将上移.加热时,Cu-Zn-Al合金一般不要超过 $A_s+30^\circ\text{C}$,升温过高,尤其在有负载的情况下,形状记忆合金很容易发生滑移变形,滑移是不可逆的过程,这样会使形状记忆效应退化.

实验证明,Cu-Zn-Al合金在 90°C 以上温度下长期放置,会使记忆效应衰减^[6],长期处于低温状态,会产生时效,影响记忆特性.

(3) 涂镀问题

Cu-Zn-Al合金的耐腐蚀性较差,因此使用时常常需要进行表面处理.经过实验证明,电镀如镀铬会使形状记忆效应几乎完全消失.涂聚四氟乙烯或树脂类的效果很好.

5 小结

如何正确合理使用形状记忆合金螺旋弹簧是实际应用开发中提出的问题.我们专门研制了形状记忆合金性能测试仪,获得了可靠的Cu-Zn-Al合金螺旋弹簧在不同温度下的负载变形量关系、应力-应变关系,并按照使用要求对弹簧的各参数进行了计算和设计.我们特别推荐了图解设计法,记忆性能测试中使用计算机采集数据后,本来就要做数据处理和图形处理,然后接着进行图形设计是十分方便的.

在整个研究过程中,特别是性能测试工作阶段,一直得到北京冶金研究所王毓毅高级工程师和秦灿同志的热情支持和帮助,并为我们提供了性能优良的形状记忆合金试样,在此表示衷心感谢.

参 考 文 献

- [1] 大塚広明, 金属, 1990年3月号, p32.
 [2] 西川雅弘, 金属, 1989年8月号, p50~53.
 [3] 邱自学, 中国科学技术大学硕士论文, 1990, p381~63.
 [4] J. E. 希格利著(美), 南京工学院、浙江大学机械原理及机械零件教研室译, 机械工程设计人民教育出版社, 1981:209.
 [5] 大阪科学技術センター形状記憶合金用途開発委員会, 形状記憶合金とその使い方日刊工業新聞社, 1987:25.
 [6] 舟久保熙康, 形状記憶合金, 産業図書, 1985:163.

Characteristic Measurement and Design for Helical Spring of Shape Memory Alloy

Yang Jie Wu Yuehua Zhou Yushen
 Zhang Changwen Wu Yuting Qiu Zixue

(Dept. of Precision Machinery and Instrument)

Abstract

A memory characteristic measuring device, developed on our own, is used for a Cu-Zn-Al shape memory alloy helical spring. Methods of helical spring design are introduced on the basis of the measurements and a number of problems are pointed out that must be noted in the actual application of shape memory alloy elements.

Key words: shape memory alloy, memory effect, memory characteristic, stress-strain curve

天然富铁黑云母中 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 的有序—无序及其岩石学意义*

杨学明

张培善

(中国科学技术大学)

(中国科学院地质研究所)

摘 要

通过对天然富铁黑云母的化学成分及穆斯堡尔谱的分析测试,精确测定了 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 在黑云母八面体晶位 M1、M2 中的占位率,提出了描述铁的有序度参数 OR 及其物理意义。运用二元固溶体理想模型建立了 OR 值与平衡温度的关系图解及函数表达式。简略阐述了黑云母铁的有序度参数 OR 在花岗岩成岩作用研究中的应用。

关键词: 黑云母, 穆斯堡尔谱, 有序度, 花岗岩

中图法分类号: P574

1 前言

无论是二八面体型云母还是三八面体型云母,八面体层(sheet)中阳离子普遍存在有序—无序现象,而四面体层中及其与八面体层之间的阳离子有序—无序却十分复杂。这不仅涉及许多晶体结构与晶体化学问题,而且与其形成条件和结晶历史也有关系。本文在对天然富铁黑云母的穆斯堡尔谱研究基础上,提出了描述黑云母晶体结构中八面体位置上 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 的有序度参数、物理意义及计算方法,并讨论该参数在研究花岗岩成岩作用时的意义。

研究样品共 16 件,分别采自湘桂交界的燕山期姑婆山花岗杂岩体不同阶段花岗岩和内蒙白云鄂博海西期花岗杂岩体不同阶段花岗岩中。这些黑云母常呈半自形—它形晶产出,深绿—棕黑色,多色性显著,Ng 常呈棕黑色、暗棕色,部分为棕黄色;Np 呈浅黄色,有时带绿色色调。据电子探针分析结果及晶体化学计算,按化学成分分类法^[1,2]样品属铁质黑云母、铁叶云母和

高铁叶云母.

2 实验方法及结果

为了减少片状黑云母的择优取向效应,在酒精中分别将每个样品研磨至 200 目以下.将 80mg 粉末样品加入 200mg 蔗糖再研磨,调合均匀后,装入直径为 1cm 的样品池内,压成厚约 1mm 的园形薄片作为吸收体.在室温下,使用恒加速度穆斯堡尔仪测定黑云母样品的穆斯堡尔谱.每个谱包含 256 个数据点.用 ⁵⁷Co(在金属钯载体中)作为放射源,以金属铁箔标定穆斯堡尔谱仪的速度,其误差 < ± 0.001mm/s.用最小二乘法在计算机上拟合劳伦兹线谱,并限制峰宽、强度、峰位和 Q. S. 值.拟合度较好,均在 95% 以上.16 个黑云母样品的穆斯堡尔谱参数列于表 1 中.典型的穆斯堡尔谱图如图 1 所示,图中点线是实验谱,细实线是拟合谱.

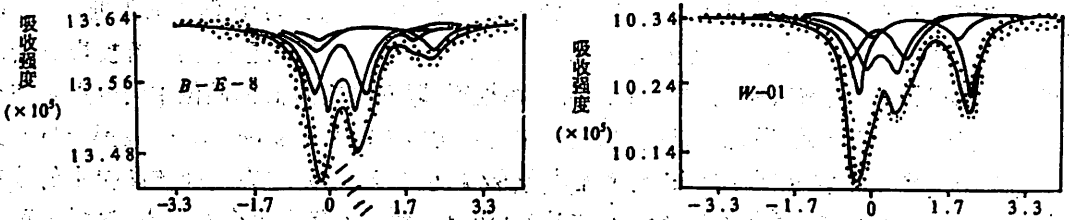


图 1 黑云母穆斯堡尔谱

表 1 黑云母的穆斯堡尔谱参数*

样品 编号	ΣFe	Fe ²⁺								Fe ³⁺							
		M2				M1				M2				M1			
		I.S.	Q.S.	Γ	A%	I.S.	Q.S.	Γ	A%	I.S.	Q.S.	Γ	A%	I.S.	Q.S.	Γ	A%
G-30	2.28	1.12	2.65	0.36	40.3					0.39	0.98	0.44	27.2	0.37	0.59	0.44	32.5
G-17	2.13	1.13	2.58	0.36	26.5	1.01	1.97	0.36	5.9	0.33	1.13	0.48	33.3	0.37	0.68	0.48	34.3
G-12	2.10	1.11	2.51	0.40	38.0	1.17	1.88	0.40	15.5	0.42	1.06	0.46	22.0	0.34	0.65	0.46	24.5
G-08	2.07	1.12	2.52	0.40	53.1	1.08	2.03	0.40	19.1	0.39	1.02	0.52	13.8	0.42	0.46	0.52	14.0
G-05	1.85	1.11	2.51	0.40	37.1	1.09	2.05	0.40	14.7	0.36	1.15	0.50	21.1	0.37	0.63	0.50	27.1
G-02	2.78	1.12	2.64	0.34	53.5	1.07	2.19	0.34	16.6	0.36	1.00	0.50	16.4	0.20	0.38	0.50	13.5
G-01	2.08	1.08	2.61	0.38	26.3	0.99	2.18	0.38	6.9	0.39	0.83	0.54	66.9				
W-01	2.01	1.13	2.51	0.40	37.0	1.14	1.89	0.40	11.2	0.36	1.12	0.46	24.4	0.37	0.65	0.46	27.4
B-E-2	1.86	1.10	2.54	0.36	28.3	1.05	2.11	0.36	10.6	0.37	1.03	0.50	31.4	0.39	0.65	0.50	29.7
B-E-4	1.97	1.12	2.46	0.44	27.2	1.13	1.83	0.44	11.0	0.36	1.14	0.50	28.5	0.32	0.66	0.50	33.2
B-E-8	2.00	1.14	2.45	0.41	13.2	1.00	2.07	0.41	7.2	0.34	1.12	0.43	37.3	0.36	0.63	0.43	42.3
B-ES-1	2.43	1.11	2.57	0.34	44.7	1.00	2.04	0.34	1.3	0.45	0.92	0.54	19.9	0.28	0.69	0.54	20.0
B-ES-25	1.88	1.11	2.54	0.40	41.3	1.04	2.19	0.40	15.2	0.44	1.09	0.52	20.3	0.42	0.51	0.52	23.1
B-ES-27	1.91	1.11	2.56	0.38	44.0	1.06	2.10	0.38	17.5	0.42	0.94	0.52	18.8	0.38	0.52	0.52	19.6
B-S-59	1.90	1.12	2.51	0.38	37.6	1.08	2.05	0.38	15.5	0.34	0.82	0.72	46.9				
B-S-61	1.82	1.12	2.50	0.36	28.3	1.06	2.09	0.36	9.3	0.36	1.12	0.46	30.5	0.38	0.62	0.46	32.0

*黑云母的化学成分由电子探针测定,计算其晶体化学式时以 11 个氧为计算基础,ΣFe 是单位分子中 Fe²⁺+Fe³⁺;I.S. 和 Q.S. 的单位为 mm/s;样品 G-01 和 B-S-59 的 Fe³⁺ 双峰为 M1 和 M2 上 Fe³⁺ 所形成.

实验表明黑云母的穆斯堡尔谱由强、弱两对不对称双峰组成.强峰是 Fe²⁺ 的谱,被拟合为两组双峰,Q.S. 值为 2.46~2.65mm/s,I.S. 值为 1.01~1.14mm/s 的谱线指派为 M2 晶位;而 Q.S. 值为 2.03~2.19mm/s,I.S. 值为 0.99~1.13mm/s 的谱线则指派为 M1 晶位. Fe³⁺ 吸收峰较弱,大部分样品中有两组对称双峰(有两个样品例外),Q.S. 值为 0.82~1.15mm/s,I.S. 值为 0.33~0.45mm/s 的谱线是 Fe³⁺ 的 M2 晶位;而 Q.S. 值为 0.38~0.69mm/s,I.S. 值为 0.20~0.42mm/s 的谱线指派为 Fe³⁺ 的 M1 晶位. 这些结果与三八面体云母的穆斯堡尔谱拟合的 Fe²⁺、Fe³⁺ 位置参数合理值范围完全一致^[3]. 因此,本文测定的黑云母的穆斯堡尔谱及拟合结

果是令人满意的,这些黑云母样品属三八面体型云母。

3 讨论

云母的化学组分对穆斯堡尔谱参数的影响不大^[3],尽管云母八面体层中锂的置换会影响 Fe²⁺在 M1 晶位双峰的四极分裂^[3],亦可能出现 Fe²⁺的 M1 及 M2 位的 Q. S. 与 (Mg/Mg+Fe²⁺) 比值呈不太好的线性关系^[4]。然而,要确定 Fe²⁺、Fe³⁺在 M1、M2 晶位中有序—无序与其形成条件的关系,必须精确测定 Fe²⁺、Fe³⁺在 M1、M2 晶位中的占位率。表 1 和图 1 清楚地表明:穆斯堡尔谱精确地标定出 Fe²⁺、Fe³⁺在 M1、M2 晶位的分布特征。由穆斯堡尔谱检测出 Fe²⁺、Fe³⁺在 M1、M2 晶位的双峰面积,以及由晶体化学计算获得的单位分子式中总铁含量 ΣFe,计算出 Fe²⁺、Fe³⁺在 M1、M2 晶位上的占位率(表 2)。

以占位率参数 I₂ 与 I₁ 及 R₂ 与 R₁ 作图(图 2、3)可以看出,黑云母中 Fe²⁺ 主要进入 M2 晶位,Fe³⁺ 则主要进入 M1 晶位;投影点呈双曲线分布,且偏离对角线位置。显然,若投影点沿对角线分布,说明 Fe²⁺ 在 M1、M2 晶位中的分布几率相等,即 Fe²⁺ 在八面体晶位中的分布是完全无序的。同理,Fe³⁺ 亦如此。因此,将图 2 和图 3 中的对角线 OB 线称为 Fe²⁺、Fe³⁺ 在黑云母八面体晶位中的无序分布线。如果投影点偏离无序分布线,说明 Fe²⁺、Fe³⁺ 在八面体晶位中的分布是部分有序的。无序分布线上的 D 点与 C 点连线,C 点在理论上代表完全有序点。这样便可引出一个铁的有序度参数 OR。在 D 点有序度 OR 定义为零;在 C 点,OR 定义为 1。按等距划分,将 DC 线分成 10 等份,从 D 点到 C 点有序度 OR 值依次为 0,0.1,0.2……1.0(图 2、3)。

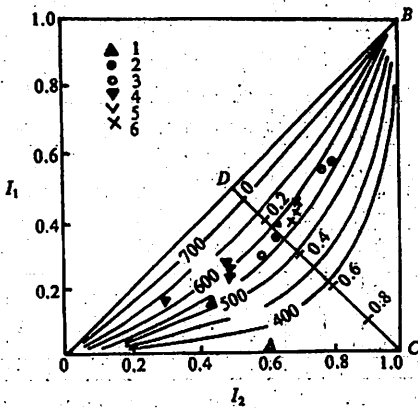


图 2 黑云母的 I₂ 对 I₁ 及有序度 OR 关系

(1—3)分别为姑婆山花岗岩体第一、二、三阶段花岗岩中的云母样品;4—6分别为白云鄂博花岗岩杂岩体第一、二、三阶段花岗岩中的云母样品)

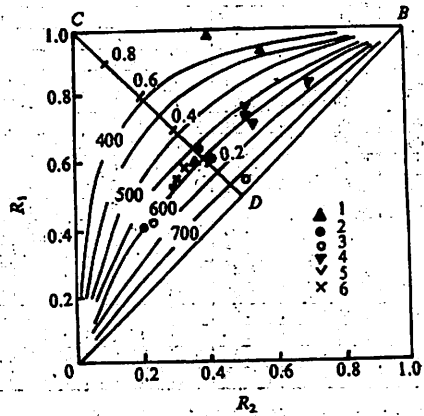
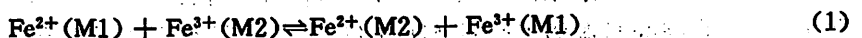


图 3 黑云母的 R₂ 对 R₁ 及有序度 OR 关系

图例同图 2

影响黑云母阳离子有序—无序的因素有晶体化学因素,温度、氧逸度、压力和冷却历史等。如果只考虑最主要的温度因素,并把富铁黑云母看作是 Fe²⁺ 和 Fe³⁺ 的理想二元固溶体。则 Fe²⁺ 和 Fe³⁺ 在 M1 与 M2 晶位之间的分配可被当作离子交换的热力学过程



其反应的自由能变化可写成

$$\Delta G_B = \Delta G^{\circ}_B + RT \ln \left[\frac{a_{Fe^{2+}}^{M2} \cdot a_{Fe^{3+}}^{M2}}{a_{Fe^{2+}}^{M1} \cdot a_{Fe^{3+}}^{M1}} \right] \quad (2)$$

其中 ΔG_B 是自由能的变化, ΔG°_B 是温度为 T 和一个大气压下标准自由能变化, a 为活度, T 为绝对温度, R 是气体常数. 设理想固溶体活度系数为 1. 在一定温度下, 当离子交换平衡时, $\Delta G_B = 0$. 所以, 式(2)可改写成

$$\Delta G^{\circ}_B = - RT \ln \left[\frac{I_2(1 - I_1)}{I_1(1 - I_2)} \right] = - RT \ln K \quad (3)$$

其平衡常数为 $K = \frac{I_2(1 - I_1)}{I_1(1 - I_2)} = e^{-\Delta G^{\circ}_B / RT} \quad (4)$

表 2 黑云母 Fe²⁺、Fe³⁺ 在八面体晶位的占位率及参数

样品号	Fe ²⁺	Fe ²⁺	Fe ²⁺ M2	I ₂	I ₁	R ₂	R ₁	OR
	Fe ²⁺ +Fe ³⁺	Fe ²⁺ +Fe ³⁺	Fe ²⁺ M1					
G-30	0.597	0.403		0.60	0.00	0.40	1.00	
G-17	0.676	0.324	2.15	0.44	0.15	0.16	0.85	0.38
G-12	0.460	0.540	1.26	0.64	0.39	0.36	0.61	0.26
G-08	0.278	0.722	1.41	0.79	0.57	0.21	0.43	0.27
G-05	0.482	0.518	1.78	0.64	0.35	0.36	0.65	0.28
G-02	0.299	0.701	1.62	0.77	0.55	0.23	0.45	0.26
G-01	0.699	0.331	1.93	0.28	1.00	0.72	0.00	
W-01	0.518	0.482	1.68	0.60	0.29	0.40	0.61	0.33
B-E-2	0.611	0.389	1.30	0.47	0.27	0.53	0.73	0.22
B-E-4	0.627	0.383	1.20	0.49	0.25	0.51	0.75	0.24
B-E-8	0.796	0.204	0.91	0.30	0.17	0.70	0.83	0.27
B-ES-1	0.399	0.601	1.97	0.69	0.43	0.31	0.57	0.23
B-ES-25	0.434	0.566	1.33	0.67	0.40	0.33	0.60	0.27
B-ES-27	0.385	0.615	1.27	0.70	0.47	0.30	0.53	0.29
B-S-59	0.469	0.531	1.66	0.44	1.00	0.56	0.00	
B-S-61	0.625	0.375	1.53	0.49	0.23	0.51	0.77	0.30

* Fe²⁺ 在 M1、M2 晶位的占位率分别为 $I_1 = (Fe^{2+}/Fe^{2+} + Fe^{3+})_{M1}$, $I_2 = (Fe^{2+}/Fe^{2+} + Fe^{3+})_{M2}$; Fe³⁺ 在 M1、M2 晶位的占位率分别为 $R_1 = (Fe^{3+}/Fe^{2+} + Fe^{3+})_{M1}$, $R_2 = (Fe^{3+}/Fe^{2+} + Fe^{3+})_{M2}$. OR 由图 2.3 读出的数的平均值

显然, I_2 与 I_1 的关系是一个与温度相关的双曲函数. 由实验资料^[5-9]可计算出不同平衡温度下的 ΔG°_B 的值. 再由(4)式作出不同平衡温度下的 I_2 对 I_1 关系曲线, 绘于图 2 中. 同理, 也可以作出 R_2 对 R_1 与温度关系曲线(图 3). 需要说明的是图 2 和图 3 中曲线上的温度表示保持 Fe²⁺、Fe³⁺ 在 M1、M2 晶位中占位率的平衡温度. 虽然这种平衡温度并不能完全代表黑云母的结晶温度, 但在一定程度上可反映其形成温度, 并且可以反映寄主岩石的冷却历史.

从图 2 和图 3 可知, 平衡温度越高, OR 值越小; 平衡温度越低, OR 值越大. 比起 I_2 、 I_1 和 R_2 、 R_1 参数, 有序度 OR 更能准确地反映黑云母的结构状态. 确定有序度 OR 值的步骤是, 将穆斯堡尔谱测得的已知成分的富铁黑铁黑云母的 Fe²⁺、Fe³⁺ 在八面体位置中的占位率 I_2 、 I_1 和 R_2 、 R_1 分别投在图 2 和图 3 上, 按投影点所标定的平衡温度曲线与 CD 线的交点, 便可读出 OR 值. 若投影点不落在平衡温度曲线上, 可按投影点附近的曲线进行内插法求得 OR 值.

从图 2 中可知, CD 线的轨迹方程可表示为

$$I_1 = 1 - I_2 \quad (5)$$

将(5)式代入(4)式, 得出在 CD 线上 I_2 与平衡温度的关系式

$$I_2 = \left[\frac{\sqrt{e^{-\Delta G^{\circ}_B / RT}}}{1 + \sqrt{e^{-\Delta G^{\circ}_B / RT}}} \right] \quad (6)$$

显然, 在图 2 中的 CD 线上的 I_2 变化, 只有当 $0 < I_2 < 1$ 时, (6)式有效. 在这段区间上, 有序度 OR 与 I_2 的关系可用下式表示

$$OR = 2I_2 - 1 = \frac{\sqrt{e^{-20^2 \frac{1}{RT}}} - 1}{\sqrt{e^{-20^2 \frac{1}{RT}}} + 1} \quad (7)$$

(7)式表明,有序度 OR 是个强度变量.它表示了有序度 OR 值与平衡温度 T 的函数关系.

4 应用

姑婆山花岗杂岩体位于湖南省江华县和广西省贺县的交界处,以富含稀有和稀土元素引起地质界的广泛注意^[10,11].该杂岩体呈不规则扁圆状岩基产出,出露于华南加里东褶皱带南岭东西向构造带西部^[12],受近东西向及北北东向断裂构造的复合控制^[13].岩体东部切割了加里东期大宁花岗闪长岩体,南部、西部及北部与寒武系砂页岩、泥盆系和石炭系灰岩呈侵入接触关系,接触变质作用和接触交代作用显著.

全岩铷-锶同位素测定表明岩体形成年代属燕山期^[14,15].岩相学、岩石化学和同位素年代学等研究均表明姑婆山花岗杂岩体岩浆演化可分为三个阶段.第一阶段中粗粒钾长花岗岩与第二阶段中细粒钾长花岗岩是壳源物质经部分熔融作用的产物,第三阶段细粒碱长花岗岩则是第二阶段岩浆的分异产物^[16].从成岩温度上看岩浆演化从早到晚,成岩温度变化为 690→700→560℃^[17],而黑云母有序度 OR 值的变化为 0.32→0.27→0.29(图 2),相应的平衡温度为 510→540→525℃.说明,黑云母铁的有序度较好地反映了花岗杂岩体的演化特征及成岩方式.

第一阶段中粗粒花岗岩,形成岩基状侵入岩,出露面达 480km²,成岩温度较低,冷却较慢.第二阶段中细粒花岗岩,形成较小的岩基状侵入岩,出露面积约 120km²,成岩温度较高,冷却稍快.第三阶段细粒花岗岩为第二阶段花岗岩浆结晶分异作用的残余岩浆凝结的产物,主要呈岩株状、岩枝状分布在第一、二阶段花岗岩的交合地带此阶段岩浆温度较低,冷却亦较快.

5 结论

1. 黑云母铁的有序度参数 OR 是一个取决于平衡温度的强度变量,它可以很好地描述 Fe²⁺、Fe³⁺在八面体晶位中的有序-无序现象. OR 值越大,表明八面体晶位中铁离子的有序程度越高,造成这种结构状态的平衡温度越低;反之,OR 值越小,则反映铁离子的有序度越低,相应的平衡温度越高.

2. 黑云母铁的有序度 OR 可以用来解释花岗岩的成岩演化特征和冷却历史.

致谢:本文的工作过程中,叶大年、应育浦研究员和李哲副研究员曾给予热情帮助和支持,在此致以诚挚的谢意.

参 考 文 献

- [1] Fester M D, U.S. G. S. Prof. Paper, 354B(1960), 11-44.
- [2] 刘昌实,桂林冶金地质学院学报,4(1984),1-14.
- [3] Dyar M D, Am. Mineral., 72(1987), 102-112.
- [4] 陈图华等,矿物学报,8(1986),44-50.

- [5] Chanda U, *et al.*, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 15(1982), 2331-2340.
- [6] Gendler T S, *et al.*, *Geochem. Int.*, 15(1978), 17-22.
- [7] Levillain C, *et al.*, *Phys. Chem. Minerals*, 7(1981), 71-76.
- [8] Heller-Kallai L, *et al.*, *Phys Chem. Minerals*, 7(1981), 223-238.
- [9] Tripathi R P, *et al.*, *J. Inorg. Nucl. Chem.*, 40(1978), 1293-1298.
- [10] 中国科学院地质研究所, 富钟贺矿物志, 科学出版社, 1965, 1-10.
- [11] 中国科学院地球化学研究所, 华南花岗岩类的地球化学, 科学出版社, 1979, 278-302.
- [12] 黄汲青等, 中国大地构造及其演化, 科学出版社, 1981, 29.
- [13] 地质矿产部《南岭项目》构造专题组, 南岭区域构造特征及控岩控矿构造研究, 地质出版社, 1988.
- [14] 张德全等, 地质论评, 31(1985), 232-239.
- [15] 杨学明等, 科学通报, 35(1990), 35(1990), 1174-1175.
- [16] Yang Xueming, *et al.*, *J. Rare Earths*, 9(1991), 60-65.
- [17] 龚安等, 桂林冶金地质学院学报, 5(1985), 21-30.

The Order-Disorder of Fe^{2+} and Fe^{3+} in Natural Iron-Rich Biotite and Its Significance for Petrology

Yang Xueming

(University of Science and Technology of China)

Zhang Peishan

(Institute of Geology, Academia Sinica)

Abstract

This paper accurately determines the occupancy ratios of Fe^{2+} and Fe^{3+} in octahedral sites M1 and M2 of iron-rich biotites, respectively, by means of measuring their compositions, Mössbauer spectra. A new parameter OR is suggested to describe the ordering of iron in iron-rich biotites. OR is an intense variable which depends on the equilibrium temperature. The functional relation between OR and the equilibrium temperature is established by using the idealized model of binary solid solution. The higher OR values represent the higher ordering of iron ions in the octahedral sites of iron-rich biotite while the lower equilibrium temperature keeps the structural states. It is convenient and effective to utilize OR of iron-rich biotite to explain petrogenic evolution of granite complex and its cooling history with petrological studies.

Key words: biotite, Mössbauer spectrum, ordering, granite

γ 辐照 PET 的结构变化与偶极热 松弛运动的研究

张兴元

(中国科学技术大学)

周漪琴 章吉祥

(青岛大学)

摘 要

大剂量($>50\text{Mrad}$) γ 辐照使 PET 分子链断裂并导入含氧的苯环基团. 短路热释电流温度谱显示 α 峰随辐照剂量增大向低温移动, 被冻结的大分子主链链段偶极热松弛活化能和热松弛时间常数受辐照剂量的影响较小.

关键词: 聚对苯二甲酸乙二醇酯, γ 辐照, 热释电流, 偶极热松弛

中图分类号: O631.22

聚对苯二甲酸乙二醇酯(PET)存在不同尺寸运动单元的分子运动. 拉伸和热处理都会使分子链构象发生改变, 排列趋于规整, 致使主链链段运动受到不同程度的牵制. 用短路热释电流(TSC)方法研究分子运动不但灵敏度高, 而且可获得一些用其它方法难以得到的微观分子运动参数^[1-2]. 经拉伸取向的 PET 分子, 因构象发生改变, 主链链段运动参数受到较大影响^[3]. 本文利用 TSC 法灵敏度高的特点, 测定了经不同剂量 γ 辐照 PET 膜的热释电流谱, 研究了大剂量 γ 辐照后的结构变化以及对玻璃化转变温度、偶极热松弛活化能和偶极热松弛时间常数的影响.

1 实验部分

PET 非晶厚片(500 μm)由常州绝缘材料厂提供. 厚片在室温下用⁶⁰Co γ 辐射源辐照, 剂量

率为 0.85Mrad/h.

用于热释电研究的试样经两面真空镀膜,在驻极体热分析仪(日本东洋精机制造)上测定短路电流-温度谱.电流感量为 10^{-12} A,输入阻抗高于 $10^{12}\Omega$.极化场强 $E_p=50\text{kV/cm}$,极化时间 $t_p=20\text{min}$,极化温度 $T_p=80^\circ\text{C}$.

用美国 Waters-150C 型凝胶渗透色谱仪和 PET 分级标样作参比测得 γ 辐照 PET 的分子量,溶剂为邻氯苯酚,淋洗液为氯仿.试样的基本参数见表 1.

表 1 γ 辐照 PET 试样的基本参数

试样编号	辐照剂量 (Mrad)	数均分子量 $\overline{M}_n(\times 10^3)$	重均分子量 $\overline{M}_w(\times 10^4)$	分散度 D
R-0	0	6.58	1.83	2.77
R-1	51	4.46	1.69	3.78
R-2	121	4.45	1.72	3.87
R-3	205	4.08	1.47	3.61
R-4	301	3.13	1.34	4.26
R-5	402	2.66	1.33	4.98

富里哀变换红外光声光谱(FTIR/PAS)系由美国 Nicolet170SX 型 FTIR 分光光度计和吉林大学 JDV-1 型光声探测器在动镜扫描速度为 0.2498cm/s , 4cm^{-1} 分辨率, N_2 气氛下扫描 1500 次得到.

由日本 RigakuD/max-r/A X 射线分析仪(Cu K_α 辐射源, Ni 滤波)测得试样的宽角 X 射线衍射图.用日本 UV-240 型分光光度计和未经辐照的非晶 PET 试样作参比测得 γ 辐照试样的紫外和可见光吸收光谱.试样的热谱是在美国 Perkin-Elmer 公司的 DSC-2C 型示差扫描量热计上测得的,升温速率为 $10^\circ\text{C}/\text{min}$.

2 结果和讨论

实验测定了表 1 所列试样在三组升温速率下室温以上的热释电流谱图.以 R-4 为例示于图 1 中(其它试样的图形类似).在较低温度下出现的电流峰是由被冻结的主链链段偶极热松弛所贡献(α 峰),在较高温度出现的是解俘获电流峰(ρ 峰),它归因于陷阱载流子在热刺激下的解俘获^[1].图 1 表明,随着升温速率的提高,两个电流峰峰温 T_α 、 T_ρ 均向高温区移动,电流极值也随之增大.

从试样的 TSC 谱图中可得到 α 峰峰温 T_α (对应于玻璃化转变温度). T_α 与辐照剂量的关系如图 2 所示.辐照剂量增大, T_α 线性降低.图 2 中示出的 DSC 结果说明了随辐照剂量增大,玻璃化转变温度 T_g 也线性减小.由两种方法得到的结果显示变化趋势是一致的,不同的仅是数值上的差异.

据 Bucci-Fieschi 理论,被冻结偶极热松弛运动电流方程为^[4-6]:

$$J_s(T) = \frac{P_s(T_s)}{\tau_0} \exp\left(-\frac{\Delta H}{KT}\right) \exp\left[-\frac{1}{\beta\tau_0} \int_{\tau_0}^T \exp\left(-\frac{\Delta H}{KT'}\right) dT'\right] \quad (1)$$

式中 $P_s(T_s)$ 为平衡极化强度, ΔH 为偶极热松弛活化能, τ_0 为偶极热松弛时间常数, β 为升温速率, K 为 Boltzmann 常数. 由 $\frac{dJ_s(T)}{dT} = 0$ 可得到出现电流极值时

$$T_m^2 = \frac{\Delta H \cdot \beta}{K} \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta H}{KT_m}\right) \quad (2)$$

由 $\ln J_s = C - \frac{\Delta H}{KT}$ (3)

可求出 ΔH , 再通过 (2) 式可得到 τ_0 .

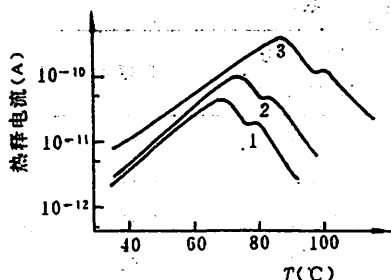


图 1 R-4 试样的热释电流谱图
升温速率: (1) 2°C/min,
(2) 5°C/min; (3) 15°C/min

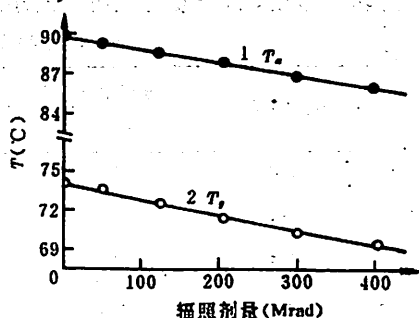


图 2 T_m 、 T_g 和辐照剂量的关系
升温速率: (1) 15°C/min,
(2) 10°C/min.

ΔH 和 τ_0 与辐照剂量的关系如图 3 所示. 可看出尽管辐照剂量达 400Mrad, 样品力学性能已遭辐射破坏, 但偶极热松弛活化能和时间常数几乎未变. 为了验证 ΔH 和辐照剂量的关系, 图中给出了用 DSC 方法得到的 γ 辐照 PET 的玻璃化转变区比热 ΔC 与辐照剂量的关系, 辐照剂量增大, ΔC 也几乎未变.

研究表明, PET 分子链经拉伸取向, 构象发生不同程度的改变, 导致 ΔH 和 τ_0 发生变化^[3].

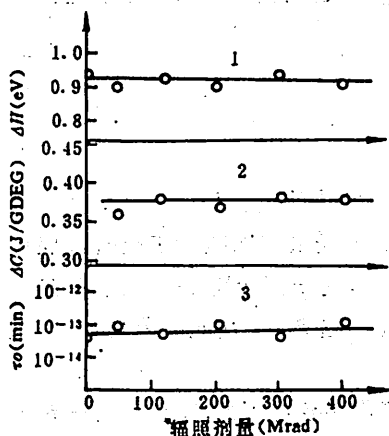
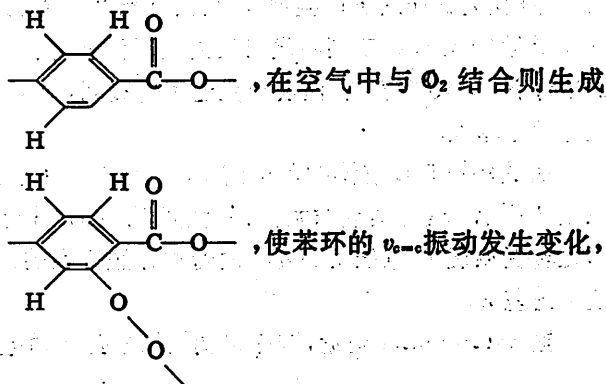


图 3 γ 辐照 PET 的 ΔH 、 ΔC 、 τ_0 和辐照剂量的关系
升温速率 (1)、(3) 5°C/min;
(2) 10°C/min.

在 γ 辐照 PET 的 FTIR/PAS 谱图中, 未发现任何构象谱带的改变, 说明辐照未引起分子链构象变化. 但是试样在 $1500 \sim 1580 \text{cm}^{-1}$ 范围的谱带却随 γ 辐照剂量的增大, 明显发生变化. $1500 \sim 1580 \text{cm}^{-1}$ 范围内的谱带与分子链上苯环的 $\nu_{C=C}$ 振动有关. PET 经大剂量 γ 射线辐照后会产生自由基^[7]



表现在 $1510 \pm 8\text{cm}^{-1}$ 和 $1577 \pm 8\text{cm}^{-1}$ 范围内的谱带强度改变^[8-9]。以 793cm^{-1} 作为内标参比谱带^[10]，得到的光声信号强度比 I/I_{793} 如图 4 所示。随着辐照剂量的增大，三个谱带光声信号强度都明显上升，说明所含吸电子氧的苯环基团浓度随辐照剂量增大而上升。研究还发现试样的紫外可见光光密度随辐照剂量升高而增大(图 5)，也说明试样经 γ 射线辐照后所含苯环基团浓度随辐照剂量升高而增加。

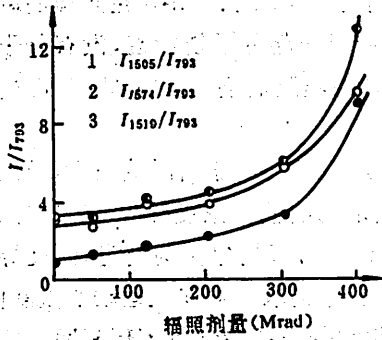


图 4 C=C 伸缩振动谱带强度与辐照剂量的关系

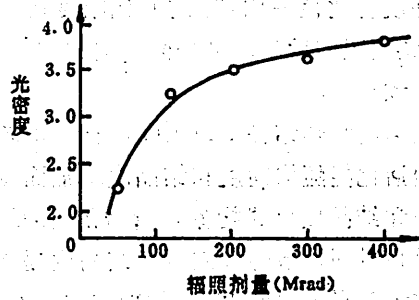


图 5 γ 辐照 PET 的最大光密度与辐照剂量的关系

γ 辐照效应的重要特征是分子链的降解或交联。在大剂量 γ 辐照 PET 的研究中还没有发现任何凝胶形成。分子量分布的测试结果如图 6 所示。随辐照剂量的增大，平均分子量逐渐变小，即分子链被 γ 射线切断。辐照剂量越大，切断处越多，平均分子量越小。

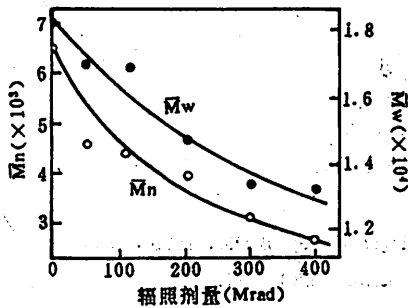


图 6 平均分子量与辐照剂量的关系

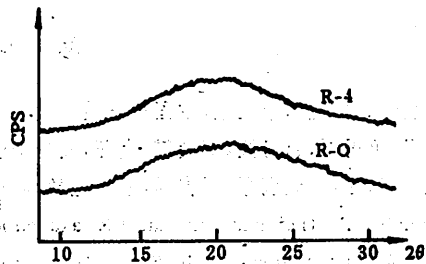


图 7 γ 辐照 PET 的宽角 X 射线衍射图

宽角 X 射线衍射结果(图 7)说明尽管辐照剂量已达 400Mrad,也无任何晶体形成。

综上所述可知,大剂量 γ 辐照引起的结构变化之一是分子链中含氧取代基的苯环基团相对浓度随辐照剂量提高而增大;引起的结构变化之二是分子链被切断。

图 2 中,试样的 T_g 和对应于 TSC 谱图中的 T_g 都随辐照剂量增加而降低,这是由于 T_g 对应于被冻结分子主链的链段运动,当辐照剂量增大时,不但分子链变短,而且分子量分布也变得愈来愈宽。这些低分子量的物质在体系中起着类似增塑剂的作用,使得体系的 T_g 下降。因此辐照剂量的增大,导致对应于玻璃化转变温度的 T_g 降低。

尽管 T_c 、 T 随辐照剂量增大变化趋势一致,但从图 2 可见 T_c 要比 T 高得多. 由于两种实验采用的升温速率相差不大,而与 TSC 方法对应的频率(相当于 $10^2 \sim 10^6 \text{Hz}$)也不高,因此这种差别不能用升温速率或作用力频率来解释. 可以设想, PET 分子中有些苯环平面沿薄膜平面方向取向,测定热释电流时,电流垂直于薄膜平面,苯环平面与电流方向垂直,这样电流流动受阻,使出现电流峰的温度(T_c)升高. DSC 测试时,没有 TSC 中的这种方向问题,相应的 T ,也就较低. 在研究取向和热结晶 PET 时,发现苯环在平面内的取向增加还导致在同样的取向度和结晶度变化范围内, T_c 的变化幅度比 T 大. 由于 γ 辐照只引起分子链断裂,没有分子链重排,因此辐照前后苯环沿平面方向的取向没有变化,在同样的辐照剂量范围内, T_c 和 T 的变化幅度大致相等.

在取向和热结晶 PET 中,分子链规整排列使结晶微区数目增多,非晶区域减少,导致偶极热松弛活化能随取向度和结晶度增加而减小,其本质是可取向的偶极浓度减少. 另一方面,由于取向和结晶使反式构象含量增加,而反式构象位能较低,比旁式构象更为稳定,因此导致偶极热松弛时间常数随取向度和结晶度提高而增长,体现了分子链取向对偶极运动的限制作用.

在大剂量 γ 辐照 PET 试样中,结构仅发生分子链变短和分子链中含氧苯环基团浓度增大两种变化. 偶极热松弛运动是与非晶区域中的分子链段有关的松弛运动,因此分子链变短和含氧苯环基团浓度增加都不会使试样中参与偶极热松弛的量在辐照前后发生较大变化,所以随辐照剂量增大, ΔH 没有多大变化. DSC 研究结果也证明对应于非晶区域的玻璃化转变比热 ΔC 与 ΔH 有类似的变化趋势(图 3). 因为玻璃化转变比热反映了非晶区量的多少,辐照前后整个非晶区域的总量并未改变,因此 ΔC 也无明显变化,与 ΔH 一致.

此外 γ 辐照只引起分子链变短,不引起分子链构象变化,因而并不影响分子链段的偶极热松弛运动,故 τ_0 随辐照剂量的变化也无多大改变.

参 考 文 献

- [1] 周漪琴,曹森涌,李玉荣,中国科学技术大学学报,11(1981),67.
- [2] 张贤,鲁勇军,赵芳儒,刘尚琪,余珏,高分子通讯,1985, No. 1, 11.
- [3] 张兴元,张贤,周漪琴,章吉祥,应用化学,5(1988),44.
- [4] Braunlich P, Thermally Stimulated Relaxation in Solids, Springer-Verlag, Berlin, 1979: 135.
- [5] Turnhout J, Electrets, Ed. by Sessler G M, Springer-Verlag, Berlin, 1980: 81.
- [6] Turnhout J, Polym. J., 2(1971), 173.
- [7] Turner D T, The Radiation Chemistry of Macromolecules (Vol. 2), Ed. by Dole M, Academic Press, New York, 1973: 137.
- [8] Bellamy L J, 黄维垣, 聂崇实译, 复杂分子的红外光谱, 科学出版社, 北京, 1975: 73.
- [9] 王宗明, 何欣翔, 孙殿卿, 实用红外光谱学, 石油工业出版社, 北京, 1982: 170.
- [10] Schmidt P G, J. Polym. Sci., A-1(1963), 1271.

Study of Structure and the Dipolar Thermal Relaxation on γ -Irradiated PET Films

Zhang Xingyuan

(University of Science and Technology of China)

Zhou Yiqin Zhang Jixiang

(Qingdao University)

Abstract

The behavior of dipolar thermal relaxation of γ -irradiated poly(ethylene terephthalate) (PET) is studied by the method of TSC. ^{60}Co γ -irradiation of a larger dose (50-500Mrad) leads to the breaking of macromolecular chains and the increasing of group density of phenyl with oxygen in PET. The α peak of short-circuit thermally stimulated current shifts to the lower temperature when the irradiation dose is increased. The γ -irradiation has no remarkable effect on the activation energy and the time constant of dipolar thermal relaxation for the main chain segmental motion in amorphous region of γ -irradiated PET films.

Key words: poly (ethylene terephthalate), γ -irradiation, thermally stimulated current, dipolar thermal relaxation

高功率激光系统中的三程放大器

郭大浩 吴鸿兴 王声波 戴宇生 夏小平

(物理系)

摘 要

在高功率钕玻璃激光系统中,使用三程放大技术,从一级钕玻璃放大器(钕玻璃棒 $\phi 20 \times 500$,双灯泵浦)中获得了约230倍的增益,同时实现了准确的光路延时。

关键词: 高功率激光,三程放大器

中图法分类号: TN248.12

在高功率激光系统中,必须设置若干级激光放大器,而且这种放大器通常是采用激光束一次通过的单程放大的方法。但是当激光束光强较弱时,单程放大方式远不能充分利用放大器的贮能。为此,我们开始使用“三程放大”的方法来充分提取一个放大器的贮能^[1]。制成比较实用的“三程放大器”并已应用在“万兆瓦可调谐窄线宽新型钕玻璃激光装置”中^[2]。

1 三程放大器的光路及排布

在通常的行波放大器中,光束从A到B通过放大介质时,光束中心线与激光棒中心轴重合,光束口径与棒直径也相适应。现在,我们在激光棒的两端,设置一对全反射镜 M_1 及 M_2 ,使棒的直径约为入射激光束口径的4倍。同时,入射激光束中心偏离棒的中心,即第一次入射光束 AM_1 大致与棒轴线平行但沿棒的一侧通过。从 M_1 反射的光线则与棒轴线成一定交角第二次通过棒而射到反射镜 M_2 。从 M_2 再反射的光束则沿棒另一侧第三次通过棒而到达B点,见图1。

两个全反射镜 M_1 、 M_2 采用半圆形的平面镜,其表面蒸镀对于 $1.06\mu\text{m}$ 全反射及 $0.6328\mu\text{m}$ 光波为高反射率的介质膜。它们的布置如图2所示。其中,O点为激光棒中心轴线通过的位置。半圆镜置于O点之一侧,阴影部份为遮光板,只留一定大小的小圆形作为有效反射面。O点的另一侧无反射镜,留待光束通过。两全反射镜均装在多维光学调整架上,可根据需要调节其相对距离及方位。

这个三程激光放大器的激光棒采用 $\phi 20 \times 500$ 的硅酸盐钹玻璃, 为防止自激振荡, 棒端面磨斜约为 3° . 侧面以蒸馏水循环冷却. 使用两支 $\phi 20 \times 500$ 脉冲氙灯作泵浦源, 贮能电容器为 $4 \times 150 \mu\text{F}$ /每灯, 充电电压约为 $2500-3500\text{V}$.



图 1 三程放大器示意图

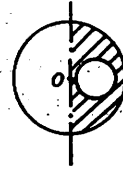


图 2 全反射镜的布置

2 三程放大器的作用及其调试要求

在高功率激光系统中的三程放大器有两个作用: 其一是充分利用其贮能, 使一个放大器几乎起到三个放大器的作用, 从而可以减少全系统中放大器的数目; 其二是使激光束在通过它的同时产生一个合适的时间延迟, 以便激光束在从 A 点到达 B 点时能与分别处在 A 点及 B 点的两个电光开关的开启时间同步。

按照图 1 的布局, 电脉冲讯号从 A 到 B 在长度为 L 的电缆中传播, 其传播速度为

$$v = \frac{2}{3}C \quad (1)$$

式中 C 为真空中的光速. 光讯号从 A 到 B 经过的光程为

$$l' = l_1 + 3l_2 + 3nl_3 + 3l_4 + l_5 \quad (2)$$

式中 $n = 1.506$, 是钹玻璃介质对 $1.06 \mu\text{m}$ 光波的折射率, 在我们的装置中, $l_1 = 1.00\text{m}$, $l_2 = 0.37\text{m}$, $l_3 = 0.52\text{m}$, $l_4 = 0.39\text{m}$, $l_5 = 1.02\text{m}$. 为了使从 A 点出发的电讯号和光脉冲能在同一时刻到达 B 点, 要求

$$L = \frac{2}{3}l' \quad (3)$$

可得出 $L = 4.43\text{m}$. 根据示波器对光脉冲波形的观测证明了这种布置实现了光脉冲与电讯号的精确同步。

在调试三程放大器光路时, 应防止产生自激振荡. 一般是使用 He-Ne 激光束模拟实际的钹激光束光路, 调节好两个全反射镜 M_1 、 M_2 的位置及方向. 然后在 A、B 点各放一张黑相纸, 让泵浦灯工作在较高能量下, 若黑相纸上有烧灼斑, 说明有自激振荡, 重新调节 M_1 及 M_2 , 这样重复调节和试验, 达到既不产生自激振荡又能获得较理想的激光放大输出为止。

3 单程放大及三程放大的放大倍数

在小信号输入时, 激光放大器的单程放大倍数 G 可从下式计算

$$G = T \exp(\beta l) \quad (4)$$

式中 T 为静态透过率, β 为介质的增益系数, l 为激光介质的有效长度. β 值与光泵能量密度 W , 有如下经验关系^[5].

$$\beta \approx 10^{-3}W, \quad (5)$$

利用 PT-1A 型体吸收能量计测得激光棒的静态能量透过率 $T=0.727$ 。棒的有效长度为 $l=45\text{cm}$ ，棒直径为 2cm 当灯的工作电压为 3500V 时，因电容为 $4 \times 150\mu\text{F}$ ，故可算得 $W=52\text{J/cm}^3$ 。于是由式(4)及式(5)得到在小信号情况下单程放大倍数约为 $G=7.55$ 。

在激光信号比较大时，会出现增益饱和现象，此时，放大倍数可由下式估算

$$G' = \frac{E_s T}{E} \ln[1 + (e^{E/E_s} - 1)e^{\beta l}] \quad (6)$$

这里， E_s 为饱和时光能量密度， E 为入射激光能量密度。 $E_s = \frac{h\nu}{\sigma}$ ， h 为普朗克常数， ν 为光波频率， σ 是受激辐射截面，对于硅酸盐钕玻璃， $\sigma=1.2 \times 10^{-20}\text{cm}^2$ ，钕激光波长 $1.06\mu\text{m}$ ，故有 $E_s=1.56\text{J/cm}^2$ 。当入射激光能量为 3.5mJ ，而入射光直径为 4mm 时，可由(6)式计算得出单程放大倍数为 7.5 。此时的入射光为小信号，该值与(4)式计算值很接近。

三程放大装置中，激光束的发散角为 0.36mrad ，光束到达 M_1 镜时，直径约为 4.4mm ，从 M_1 反射后第二次通过激光棒时的单程放大倍数由式(6)估算，为 7.2 。光束到达 M_2 时，直径约为 4.8mm ，第三次通过激光棒时，可算出其第三次的单程放大倍数约为 5.8 。

我们使用 PT-1A 型能量计，测量了放大器第一次单程放大的放大倍数以及三程放大的总放大倍数。测量结果列于表 1。

表 1

次序	1	2	3	4	5
$E_2(\text{mJ})$	3.3	3.5	3.7	3.7	3.5
$E_1(\text{mJ})$	23.3	24.1	24.8	24.9	23.9
G_1	7.1	6.9	6.7	6.7	6.8
$E_3(\text{mJ})$	790	803	824		
G_3	240	229	222		

激光放大器的工作条件同前述，输入激光脉冲宽度为 4ns 。令输入放大器的激光能量为 E_2 ，第一次单程放大后激光能量为 E_1 ，三程放大后激光总能量为 E_3 。第一次单程放大倍数为 G_1 ，三程放大的总放大倍数为 G_3 。

因此，实际测得的第一次单程放大倍数平均值为 $\bar{G}_1 = 6.8$ ，而三程总放大倍数平均值为 $\bar{G}_3 = 230$ 。

4 讨论

三程放大过程中各单程的放大倍数越来越小，这反映了介质的增益饱和效应。实测值的三程总放大倍数比第一程的单程放大倍数的三次方小得多。至于实测的三程总放大倍数为什么比计算的三程总放大倍数小，原因则比较复杂，除了计算公式本身有一定近似性外，能量 E 的测量误差也较大，特别是光泵密度 W ，中没有考虑聚光腔内各种损耗，这将导致计算的放大倍数偏大。

综上所述,在高功率激光系统中,适当使用三程放大技术,确实可减少放大器总数,达到所需的放大倍数,又同时满足必要的光路延时的效果。

上述的三程放大光路为“Z”字形,实际上也可用“又”字形,后者可能不易自振,但其输入与输出光束方向不平行。

参 考 文 献

- [1] 吴鸿兴、郭大浩等,中国科学技术大学学报,15(1985), No. 1, 30-36
- [2] 吴鸿兴、郭大浩等,中国科学(A辑), (1991), 第 8 期, 883-889.
- [3] 中国科学院上海光学精密机械研究所激光 12[#]实验装置(LF12)总体技术组,激光 12[#]实验装置(LF12)研制工作报告,1987 年,80,101.

Triple-Pass Amplifier in High Power Laser System

Guo Dahao Wu Hongxing Wang Shengbo

Dai Yusheng Xia Xiaoping

(Department of Physics)

Abstract

The triple-pass amplifying technique is used in high power Nd: glass laser system. The amplification is about 230 in one Nd:glass amplifier (Nd:glass rod is $\phi 20 \times 500$, double lamp pumped) and the accurate delay time of optical path is achieved simultaneously.

Key words: high power laser, triple-pass amplifier

诱导弛豫速率法研究水溶液中 镧系离子配合物结构

刘清亮 余华明 鲁非⁺ 谢波平

(应用化学系)

(+结构成分分析中心)

摘 要

在镧系离子配合物的水溶液中,镧系离子对配体核的核磁共振弛豫速率具有诱导效应.这种被诱导出的弛豫速率与核及离子之间距离的六次方成反比,由此可确定镧系离子在其配合物中的位置.本文测定了 La^{3+} 和 Pr^{3+} 在其烟酸配合物中与各个质子核间的相对距离,发现它们处在烟酸中羧基的角平分线上.

关键词: 镧系离子烟酸配合物,弛豫速率核,磁共振

中图法分类号: O614.33

在镧系离子配合物中,由于只有镧系离子具有 $4f$ 未成对电子,这些未成对电子由自旋所产生的磁矩是各个核由核自旋新产生磁矩的一千多倍^[1],因而对配体的某个被测核的核磁共振弛豫速率具有强烈的加速作用,以致于其它的影响可忽略.镧系离子的这种影响又主要表现在偶极—偶极弛豫和标量弛豫上^[2].这样,由镧系离子所诱导的弛豫速率的变化值可由下列 S-B 方程表示:^[3,4]

$$T_{1M}^{-1} = \frac{2}{15} \frac{g^2 \beta^2 J(J+1) \gamma_I^2}{r^6} \left(\frac{3\tau_c}{1 + \omega_I^2 \tau_c^2} + \frac{7\tau_c}{1 + \omega_S^2 \tau_c^2} \right) + \frac{2J(J+1)}{3} \left(\frac{A}{h} \right)^2 \left(\frac{\tau_c}{1 + \omega_S^2 \tau_c^2} \right)$$

式中, T_{1M}^{-1} 是当镧系离子与配体间生成一个配位键时配体被测核的纵向弛豫速率变化值, γ_I 为被测核(I)的磁旋比, g 为 Lande' g 因子, J 为总角量子数, r 为镧系离子到被测核的距离, A 为超精细偶合常数, h 为普朗克常数, ω_I 和 ω_S 为被测核(I)和电子自旋(S)的拉摩尔(Larmor)角频率, τ_c 和 τ_s 为偶极相关时间和标量相关时间. 上式中第一项为偶极—偶极弛豫项,第二项为标量弛豫项.

Inagaki 认为, 由于镧系离子的 4f 电子受到 5s 和 5p 电子的很好屏蔽, 标量弛豫项可以忽略不计^[5]. 这样, 被测核的诱导弛豫速率 T_{1M}^{-1} 近似地与镧系离子到被测核距离 r 的六次方成反比. 由于 r 很难由实验直接精确测定, 我们无法直接由上式计算出 r , 但在同一配合物溶液中, 相同元素核除与镧系离子距离 r 不同外, 上述其余参数, 如 τ_c, γ_i 等均为常数, 即 T_{1M}^{-1} 与 r^{-6} 具有正比关系, 因而两个不同核的 T_{1M}^{-1} 与 r 间有下列关系:

$$\frac{(T_{1M}^{-1})_i}{(T_{1M}^{-1})_j} = \frac{r_j^{-6}}{r_i^{-6}}$$

以上讨论的是当配体与镧系离子间生成一个配位键的情形. 当配位键不为 1 时, 由实验测出的弛豫速率变化值 T_{1P}^{-1} 与 T_{1M}^{-1} 有如下关系:

$$T_{1P}^{-1} = pqT_{1M}^{-1}$$

式中, p 为镧系离子当配体的摩尔浓度比, q 为同一配体中的配位键数目. 显然, 同一配合物溶液, p 和 q 都相同, 故有

$$\frac{(T_{1P}^{-1})_i}{(T_{1P}^{-1})_j} = \frac{(T_{1M}^{-1})_i}{(T_{1M}^{-1})_j} = \frac{r_j^{-6}}{r_i^{-6}}$$

若以某个被测核为基准, 通过计算其它核的 T_{1P}^{-1} 与基准核的 T_{1P}^{-1} 之比, 便可得到的这些核到镧系离子的相对距离, 即 $r_{其它}/r_{基准}$. 进而可确定镧系离子在配合物中的位置.

在以前的工作中, 我们曾经利用这一方法测定了水溶液中镧系离子磺基水杨酸配合物的构象^[6], 本文采用该法测定镧系离子烟酸配合物在水溶液中的构象.

实 验

$\text{La}_2\text{O}_3, \text{Pr}_6\text{O}_{11}$ 由上海跃龙化工厂生产, 纯度分别为 99.95% 和 99.5%; 烟酸(固体)由北京化工厂生产, 纯度为化学纯; D_2O 由北京化工厂生产, 纯度为 99.8%.

将烟酸(固体)置 110°C 下烘干 2 小时, 以 D_2O 溶解, 用 NaOH 溶液微量滴定其浓度.

将 La_2O_3 和 Pr_6O_{11} 用 HCl 加热溶解, 制成 LaCl_3 和 PrCl_3 溶液, 以二甲酚橙作终点指示剂, 六次甲基四胺作缓冲溶液, 以 EDTA 溶液滴定其浓度. 定量移取 LaCl_3 和 PrCl_3 溶液, 分别加热至干, 加少量 D_2O , 再加热至干, 重复三次, 使残留的 H_2O 充分置换成 D_2O . 再移入上面配制的烟酸溶液, 使其摩尔浓度比为 1:1, 浓度均为 $0.10M$, 调整 pH 值为 3.50.

用反转—恢复法在 JEOL FX-90Q 核磁共振谱仪上测得烟酸配体上所有质子 (^1H) 核的 T_1 . 测试温度: $33 \pm 1^\circ\text{C}$, 内标: DSS.

结果和讨论

镧(III)和镨(III)烟酸配合物质子核的纵向弛豫时间 T_1 均列于表 1 的第一和第三行. 从表中可以看出, 由于镨(III) 4f 电子的诱导作用, 使得配体各质子的 T_1 比不具备 4f 电子的镧(III)的配合物的 T_1 小得多.

由上述可知, 镧系离子所诱导出的净弛豫速率变化值就是镨(III)配合物质子的 T_1^{-1} 与若不含 4f 电子的镧(III)配合物质的 T_1^{-1} 之差, 但由于不存在不含 4f 电子的镨(III), 而镧(III)与

之很相似,便可用镧(III)配合物质子的 T_1^{-1} 代替。

又由于镧系离子的 4f 电子受到 5s 和 5p 电子的屏蔽,因而对配体的影响相对于 d—过渡系离子来说要小得多。因此,没有与配体直接配位的其它镧系离子,对配体上质子 T_1 的影响就不得不考虑,即必须进行外球效应的校正。方法是,在镧(III)和镨(III)的配合物溶液中同时加入相同浓度的不与镧(III)和镨(III)配位的叔丁醇溶液,在测配体质子 T_1 的同时也测定叔丁醇质子的 T_1 (见表 1 中最后一列)。将在镨(III)和镧(III)配合物中相同位置质子的弛豫速率之差减去叔丁醇在两溶液中质子弛豫速率的差值,即为由镨(III)所诱导的弛豫速率,也就是

$$T_{1P}^{-1} = [T_{1(\text{Pr})}^{-1} - T_{1(\text{La})}^{-1}] - [T_{1(\text{Pr})}^{-1} - T_{1(\text{La})}^{-1}]$$

结果列入表 1 的最后一行。

表 1 镧、镨烟酸配合物弛豫速率

	H _A	H _B	H _C	H _E	H _I	
镧(III)	T_1 (s)	1.1233	1.2061	1.1277	0.9037	1.2703
	T_1^{-1} (s ⁻¹)	0.8902	0.8291	0.8868	1.2066	0.7872
镨(III)	T_1 (s)	0.4556	0.09246	0.6249	0.08494	3.2226
	T_1^{-1} (s ⁻¹)	2.1949	10.8155	1.6003	11.7730	0.3103
ΔT_1^{-1} (s ⁻¹)	1.3047	9.9864	0.7185	10.6664	-0.4769	
T_{1P}^{-1} (s ⁻¹)	1.7816	10.4633	1.0695	0.7367	0	

表中 H_A、H_B、H_C、H_E 分别与图 1 中所标记的质子对应, H_I 为叔丁醇质子。

以镧系离子到质子 A 的距离为基准单位,按照前面介绍的方法,我们计算了镧系离子到其它质子的相对距离(见表 2 的第一行)。

表 2 镧系离子到各质子的相对距离

方法	r_B/r_A	r_C/r_A	r_E/r_A
诱导弛豫速率法	0.7444	1.0695	0.7363
诱导化学位移法	0.6973	1.1210	0.6973

表中以镧系离子到质子 A 距离为基准单位。

从图 1 的镧系与烟酸配合物结构中可以看出,由于镧系离子与羧基的氧原子配位,因此,镧系离子到质子 C 的距离应比到质子 A 的距离远,即 $r_C/r_A > 1$; 而镧系离子到质子 B、E 的距离

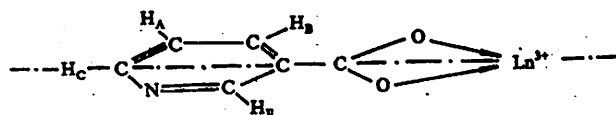


图 1 镧系离子烟酸配合物结构

应比到质子 A 的距离近,即 r_B/r_A 、 r_E/r_A 均应小于 1。我们的实验结果与之完全一致。从表 2 中还可以看出, r_B/r_A 与 r_E/r_A 近似相等,即镧系离子到质子 B 的距离(r_B)近似等于到质子 E 的距离(r_E),这说明镧系离子与羧基上的两个氧原子均生成了配位键,这也是预料之中的。因为烟酸在与镧系离子配位之前先脱去羧基上的氢,这样羧基上的两个 O 和 C 生成了 π 键,使得负电荷分布均匀,两个 O 的周围环境与配位能力完全一样,它们必然与镧系离子同时配位而使其位于羧基的角平分线上。正是由

于这一原因,我们在利用诱导化学位移方法^[7]测该配合物结构时,就曾假定铜系离子位于羧基的角平分线上. 本实验的结果完全证实了这种假设. 在表2中也列出了由诱导化学位移方法计算出的各质子与铜系离子的相对距离. 通过比较很容易发现,虽然两种方法截然不同,但他们的结果基本吻合,这也验证了两种方法都有一定的可靠性.

诱导弛豫速率方法直接进行溶液中配合物各核间的数据测试,是除诱导化学位移方法外的又一种定量测试方法. 而且前者具有后者所不具备的测试简单、计算方便、结果直观等优点,对从事溶液中含顺磁离子化合物(包括配合物)的构象研究,特别是对生物分子结构模型的设计具有重要的意义. 但由于溶液本身的复杂性,因此获得的结果有一定的偏差. 另外,该法只能给出核间的相对距离,不能得到键角等信息.

参 考 文 献

- [1] 裘祖文、裴奉奎,核磁共振波谱,科学出版社,北京,1989,528.
- [2] T. C. 法拉著[美],左其卉译,脉冲核磁共振波谱学导论,中国科学技术大学出版社,合肥,1989,69-91.
- [3] Solomon I, *Phys. Rev.*, 99(1955), No. 2, 559.
- [4] Bloembergen N, *J. Chem. Phys.*, 27(1957), 572, 595.
- [5] Inagaki F and Miyazawa T, *Prog. in NMR Spectros.*, 14(1981), 81.
- [6] 刘清亮、余华明、鲁非、朱清仁,中国稀土学报,6(1988), No. 1, 81.
- [7] 余华明,溶液中Ln(III)配合物和Fe(III)一模拟正铁色素配合物构象的NMR研究,中国科学技术大学硕士论文,1990年3月.

The Structural Study Lanthanide Complex With Nicotinic Acid in Aqueous Solution by Induced Relaxation Ratio Method

Liu Qingliang Yu Huaming

(Department of Applied Chemistry)

Lu Fei

(Center of Structure and Element Analysis)

Xie Boping

(Department of Applied Chemistry)

Abstract

The lanthanide ion has the effect of inducing the NMR relaxation rates of the determined nuclei in its coordination compound in aqueous solution. The rates induced are proportional to the inverse 6th power of the distances between the nuclei and the ion. The position of the ion can thus be determined. In this paper measurement is made of the places of La^{3+} and Pr^{3+} in their complexes with nicotinic acid in aqueous solution, with the conclusion that the lanthanide ion is located at the bisector of the carboxylic group of the ligand.

Key words: lanthanide complex with nicotinic acid, relaxation rate, NMR

ICP-AES 法测定人体血清中的 Al, Be, Cu, Mn, Mo, V 元素

曹洪奎 王文荣⁺ 魏军素 张风友 张继荣

(天津海水所)

(⁺中国科学技术大学)

摘 要

用 ICP-AES 法同时测定人体血清中 Al, Be, Cu, Mn, Mo, V 六种元素。Al, Cu, Mo 的检出限为 1—3 $\mu\text{mol/l}$, Be, Mn, V 的检出限为 0.1—0.3 $\mu\text{mol/l}$; 回收率在 100 \pm 20% 之间。该方法耗样少, 速度快。

关键词: ICP-AES, 人体血清, 微量元素

中图法分类号: O653

1 引言

用感应耦合等离子体发射光谱法(ICP-AES)对矿物、岩石、合金进行元素定量分析已获得很大进展。但用该法对人体血清中微量元素进行分析尚无报道。人体血液中微量元素和人体健康关系很大, 准确、快速测定人血液中微量元素是件很有意义的工作。ICP-AES 法测定人体血清中微量元素具有速度快、耗样少、灵敏度高和无须对血液进行消化等长处。同时, 一个多元素同时分析方法可以缩小大的系统误差。^[1]

2 实验部分

2.1 试剂

去离子水, 电阻率大于 1M Ωcm ; 浓硝酸、浓盐酸、浓硫酸均为高纯试剂; 三氯化铝、氧化铍、硫酸铜、二氧化锰、三氧化钼、五氧化二钒及氯化钠为光谱纯; 氩气, 纯度大于 99.99%; 氢氧化

钠和 10%氨水(AR).

2.2 溶液

(1) Al, Be, Cu, Mn, Mo, V 的储备溶液的浓度为 10mmol/l:

(2) 空白溶液 a 由 10mmol/l 的硝酸, 335mmol/l 的氯化钠和去离子水配成. 该溶液中氯化钠的浓度约为 70mmol/l, 而硝酸的浓度约为 5mmol/l.

(3) 混合标准溶液 g 由计算量的六种储备溶液和空白溶液 a 配成. 该溶液中 Al, Cu 的浓度为 40 μ mol/l; Be, Mn, Mo, V 的浓度为 4 μ mol/l; 氯化钠的浓度约为 70mmol/l; 硝酸的浓度约为 5mmol/l.

(4) 混合标准溶液 b, c, d, e, f 由混合标准溶液 g 用空白溶液 a 分别稀释 40, 20, 10, 4, 2 倍而得.

2.3 样品

采集于塑料管中的人体全血样品经离心分离后取出血清样品. 用 10mmol/l 的硝酸以 1:1 的比例稀释. 在分析之前, 将样品贮存在冰箱冷藏室中.

2.4 仪器

(1) ICP 光源: EH2. 5—27—(Ⅲ)—SDY2 型(石家庄市电子研究所)它激式高频等离子体光源, 水平式矩管.

(2) 摄谱仪: 东德蔡司 PGS I 摄谱仪.

(3) 测微光度计: 东德蔡司 G.I 测微光度计.

2.5 测光波长

表 1 测光波长

被分析元素	分析线波长(\AA)	内标线波长(\AA)
Al	3961	3960
Be	3131	3136
Cu	3274	3275
Mn	2605	2604
Mo	2816	2812
V	2924	2923

2.6 数据处理

设 S_a 为分析线的黑度, S_i 为内标线的黑度, $\Delta S = S_a - S_i$, γ 为乳剂特性曲线直线部分的斜率的倒数. 则

$$\lg R = \lg[\text{antilg}(\gamma \Delta S) - 1]$$

以混合标准溶液的 $\lg R$ 与其对应的浓度在半对数坐标纸上作图, 得一工作曲线(直线), 再由样品的 $\lg R$ 从工作曲线上查得样品的浓度.

张俊 王士

3 结果和讨论

3.1 检出限

本方法的六个被测元素的检出限列于表 2. 我们采用均方偏差的三倍作为检出限. 在检出

限以下的分析数据仅作参考。

表 2 检出限

元 素	Al	Be	Cu	Mn	Mo	V
检出限($\mu\text{mol/l}$)	2	0.2	3	0.1	1	0.3

3.2 准确度

加入找回试验表明,这六个元素的回收率均在 $100 \pm 20\%$ 以内。

表 3 回收率

元 素	Al	Be	Cu	Mn	Mo	V
加入量($\mu\text{mol/l}$)	10	1	10	1	1	1
找回量($\mu\text{mol/l}$)	9.8	0.84	9.9	1.10	1.05	1.09
回收率(%)	98	84	99	110	105	109

3.3 元素间的相互影响

我们在样品中加入了 NaCl,使样品中的 Na 含量与标准溶液中的基本一致。对六种被测元素相互间的影响,实验发现,在血清中这些元素的含量范围内,不会降低分析结果的准确度。

3.4 工作条件的稳定性

从测量结果看,我们这套设备的稳定性是较高的。且我们对每 10—20 个样品都作一条工作曲线,以进一步缩小因工作条件的不稳定而带来的误差。

3.5 测定结果

表 4 测定结果

元素	Al	Be	Cu	Mn	Mo	V
测定样品数	140	197	180	252	64	191
最高值	42.4	0.4	42.0	2.3	4.0	2.3
最低值	0.6	<0.1	5.8	0.06	<0.2	<0.2
平均值	11.51	0.104*	18.03	0.24	0.40*	0.32*

* 在计算平均值时,我们将那些远低于检测限的数据看作零。

本方法每测一组(六个)数据只消耗约 1ml 样品溶液。尽管我们的设备自动化程度不高,但每天也能测几十个数据,由此,测试成本不高。该方法有可能用于临床常规分析。

在实验中得到曾诚壁高级工程师的指导和孙联远同志的帮助,天津 217 医院和我们进行了友好的合作,在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] 马锦秋等,光谱学与光谱分析,8(1988),No. 4,30-31.
- [2] 贾炳韬等,光谱学与光谱分析,7(1987),No. 6,49-52.
- [3] 冯风娣等,光谱学与光谱分析,7(1987),No. 4,51-54.
- [4] 冯宗榴等,现代微量元素研究,中国环境科学出版社,1987.
- [5] Bryant R LaFreniere et al., Anal. Chem., 60(1988),23.
- [6] Shane S Que Hee and James R Boyle, Anal. Chem., 60(1988),1033.

[7] Swasono R Tamat *et al.*, *Anal Chem.*, 59(1987), 2161.

Simultaneous Analysis of Al, Be, Cu, Mn, Mo and V in Human Serum by ICP-AES

Cao Hongkui Wang Wenrong⁺ Wei Junsu
Zhang Fengyou Zhang Jirong

(Tianjin Institute of Desalination and Comprehensive Utilization of Ocean Water)

(⁺University of Science and Technology of China)

Abstract

A direct and simultaneous analysis of Al, Be, Cu, Mn, Mo and V in human serum by ICP-AES is conducted. The detection limits for Al, Cu and Mo are 1—3 $\mu\text{mol/l}$ while those for Be, Mn and V are 0.1—0.3 $\mu\text{mol/l}$. The recoveries are within 100 \pm 20%. This method has many advantages such as high speed and low sample consumption.

Key words: ICP-AES, human serum, trace element

变截面激波管中激波运动规律的初步数值研究

欧阳良彪

(近代力学系)

摘 要

利用有限差分方法求解变截面激波管中存在激波的二维流体流动问题,着重研究初始流场为静止和超音速两种情形。分析讨论所得计算结果,并和已有实验结果进行了比较。

关键词: 变截面激波管, 激波, 有限差分法, Euler 方程

中图法分类号: O354.3, O354.5

1 引言

众所周知,激波管是研究超音速和高超音速流体流动的重要实验手段。早在五、六十年代,激波通过变截面管道运动的实验研究即取得一定进展^[1-4]。通过流场显示等多种手段,人们研究了激波过后激波管内的密度分布,激波强度变化及其对管道截面积的依赖关系。从数学上严格求解激波在变截面管道中运动十分复杂,但是前人还是求出扩角较小时的线化解^[5]。Chester^[6]利用线化解迭加得到激波强度随管道截面积的变化规律。然而数学处理较为繁杂,适用范围有限,因此以这个方法作进一步深入研究有一定困难。迄今大多数探索,如特征线方法、渐近理论以及 CCW 理论^[7-9]可应用于一维、二维和三维,对一维问题比较适用。需要指出的是,这些方法有的只考虑波前静止的情况。

本文试图从计算流体力学的角度,初步探讨变截面激波管中存在激波的二维流体流动问题。分析讨论所得计算结果,并和相应实验结果进行比较。

2 数值求解

2.1 控制方程

对于图 1 所示扩张管道中的激波运动, 不计粘性、热传导效应, 控制方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \rho = -\rho \nabla \cdot \mathbf{V} \\ \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \\ \frac{\partial I}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) I = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{V} \\ p = f(\rho, T) \end{cases} \quad (1)$$

式中 I 表示内能.

边界条件

- (i) 固壁: $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n} = 0$
- (ii) 来流: 给定
- (iii) 出流: $G_{i+1j} = G_{ij}$, 其中 $G = (\rho, u, v, I)^T$

初始条件

- (i) 静止流场, $\mathbf{V} = 0$.
- (ii) 超音速定常流场

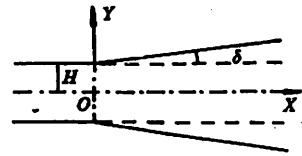


图 1 模型示意图

2.2 数值方法

(一) 网格划分

借助于对称性, 我们只需计算上半部分管道的流场: 考虑网格规则性, 采用长方形网格, 网格尺寸满足

$$\begin{aligned} \Delta Y &= H/35 & (2) \\ \Delta X &= \Delta Y / \tan \delta \end{aligned}$$

即 $I=1$ 处 Y 方向有 $35+1$ 个网格; $I=k$ 处, Y 方向有 $35+k$ 个网格. 根据实验中窗口具体位置, 取 $IN=40$, 即 X 方向分 40 个微元段. 总网格数应为 $40 \times [(35+1) + (35+40)] / 2 = 2220$. 算例中, ΔY 取 1.3mm, ΔX 取 4.5mm.

(二) 方程离散

控制方程通过流体格子法 (Fluid-in-Cell) 求解. 计算分两步进行:

第一步, 略去方程中输运项部分 $\mathbf{V} \cdot \nabla \rho, \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V}, (\mathbf{V} \cdot \nabla) I$, 仅计入压力作用项. 由于计算过程中每个格式都以质量守恒形式进行, 连续方程自动满足. 由此控制方程化为

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \\ \frac{\partial I}{\partial t} = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{V} \\ p = f(\rho, T) \end{cases} \quad (3)$$

利用半隐式 FTCS 格式, 可以导出方程 (3) 的离散化形式

$$\bar{u}_{ij} = u_{ij} - \frac{\Delta t}{\rho_{ij} \Delta X} [(p+q)_{i+\frac{1}{2}j} - (p+q)_{i-\frac{1}{2}j}] \quad (4)$$

$$\bar{v}_{ij} = v_{ij} - \frac{\Delta t}{\rho_{ij}} \left\{ \frac{1}{2V_{ij}} [S_{j+\frac{1}{2}}^j (p_{ij+1}^j - p_{ij}^j) - S_{j-\frac{1}{2}}^j (p_{ij-1}^j - p_{ij}^j)] + \frac{1}{\Delta Y} (q_{ij+\frac{1}{2}}^j - q_{ij-\frac{1}{2}}^j) \right\} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \bar{I}_{ij} = I_{ij} - \frac{\Delta t}{\rho_{ij} V_{ij}} & \left\{ \rho_{ij} (S_{j+\frac{1}{2}}^j \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}}^j - S_{j-\frac{1}{2}}^j \bar{v}_{ij-\frac{1}{2}}^j) + \frac{1}{2} q_{ij+\frac{1}{2}}^j \right. \\ & \cdot (S_{j+1}^j \bar{u}_{ij+1}^j + S_{j-1}^j \bar{u}_{ij}^j) - \frac{1}{2} q_{ij-\frac{1}{2}}^j (S_{j+1}^j \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}}^j + S_{j-1}^j \bar{v}_{ij-\frac{1}{2}}^j) \\ & - \bar{v}_{ij} S_{j+1}^j \cdot (q_{ij+\frac{1}{2}}^j - q_{ij-\frac{1}{2}}^j) - \bar{v}_{ij} S_{j-1}^j (q_{ij+\frac{1}{2}}^j - q_{ij-\frac{1}{2}}^j) \\ & \left. + S_{j+1}^j [\bar{u}_{ij+\frac{1}{2}}^j (p_{ij}^j + q_{ij+\frac{1}{2}}^j) - u_{i-\frac{1}{2}j}^j (p_{ij}^j + q_{i-\frac{1}{2}j}^j)] \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

其中 $p_{i+\frac{1}{2}j} = (p_{ij} + p_{i+1j})/2$, $\bar{v}_{ij} = (v_{ij} + \bar{v}_{ij})/2$. 而 $q_{i+\frac{1}{2}j}$ 等量为人工粘性项, 目的在于防止出现计算结果的振荡,

$$q_{i+\frac{1}{2}j} = \begin{cases} BC_{i+\frac{1}{2}j} \rho_{i+\frac{1}{2}j}^j (u_{ij} - u_{i+1j}), & \text{如 } K(u^2 + v^2)_{i+\frac{1}{2}j} < (C^2)_{i+\frac{1}{2}j}, \text{ 且 } u_{ij} > u_{i+1j} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (7)$$

式中 K 决定采用人工粘性项微元的马赫数最大值, B 则决定粘性压力项大小, 取值通常小于 0.5.

第二步, 考虑流体质量输运, 用 $\Delta M_{i+\frac{1}{2}j}^j$ 代表 Δt 时间间隔内由 S_{j+1}^j 进入网格微元 ΔV_{ij} 的质量, $\Delta M_{ij+\frac{1}{2}}^j$ 为由 $S_{j+\frac{1}{2}}^j$ 流入 ΔV_{ij} 的质量, 则有

$$\begin{aligned} \Delta M_{i+\frac{1}{2}j}^j &= \begin{cases} S_{j+1}^j \rho_{ij}^j \bar{u}_{i+\frac{1}{2}j}^j \Delta t & \text{如果 } \bar{u}_{i+\frac{1}{2}j}^j > 0 \\ S_{j+1}^j \rho_{i+1j}^j \bar{u}_{i+\frac{1}{2}j}^j \Delta t & \text{如果 } \bar{u}_{i+\frac{1}{2}j}^j < 0 \end{cases} \\ \Delta M_{ij+\frac{1}{2}}^j &= \begin{cases} S_{j+\frac{1}{2}}^j \rho_{ij}^j \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}}^j \Delta t & \text{如果 } \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}}^j > 0 \\ S_{j+\frac{1}{2}}^j \rho_{ij+1}^j \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}}^j \Delta t & \text{如果 } \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}}^j < 0 \end{cases} \quad (8) \end{aligned}$$

由质量守恒关系, 可得

$$\rho_{ij}^{j+1} = \rho_{ij}^j + \frac{1}{\Delta V_{ij}} (\Delta M_{i-\frac{1}{2}j}^j + \Delta M_{ij-\frac{1}{2}}^j - \Delta M_{i+\frac{1}{2}j}^j - \Delta M_{ij+\frac{1}{2}}^j) \quad (9)$$

相应的有

$$\begin{aligned} F_{ij}^{j+1} &= \frac{1}{\rho_{ij}^{j+1} V_{ij}} \{ T_{ij}(1) \bar{F}_{i-1j}^j \Delta M_{i-\frac{1}{2}j}^j + T_{ij}(2) \bar{F}_{ij-1}^j \Delta M_{ij-\frac{1}{2}}^j \\ &\quad - T_{ij}(3) \bar{F}_{i+1j}^j \Delta M_{i+\frac{1}{2}j}^j - T_{ij}(4) \bar{F}_{ij+1}^j \Delta M_{ij+\frac{1}{2}}^j \\ &\quad + \bar{F}_{ij}^j [\rho_{ij}^j V_{ij} + (1 - T_{ij}(1)) \Delta M_{i-\frac{1}{2}j}^j + (1 - T_{ij}(2)) \Delta M_{ij-\frac{1}{2}}^j \\ &\quad - (1 - T_{ij}(3)) \Delta M_{i+\frac{1}{2}j}^j - (1 - T_{ij}(4)) \Delta M_{ij+\frac{1}{2}}^j] \} \quad (10) \end{aligned}$$

其中 $F_{ij} = (u_{ij}, v_{ij}, E_{ij})^T$, E_{ij} 为微元 ΔV_{ij} 内流体总能, 由内能 I_{ij} 和动能 $\frac{1}{2}(u_{ij}^2 + v_{ij}^2)$ 两部分构成.

$T_{ij}(m)$ 则定义为

$$T_{ij}(m) = \begin{cases} 1 & \text{当流体通过 } m \text{ 面流入 } \Delta V_{ij} \\ 0 & \text{当流体通过 } m \text{ 面流出 } \Delta V_{ij} \end{cases}$$

其余物理量均可由此求出

$$I_{ij}^{n+1} = E_{ij}^{n+1} - \frac{1}{2}(u_{ij}^2 + v_{ij}^2)^{n+1} \quad (11)$$

$$p_{ij}^{n+1} = (\gamma - 1)I_{ij}^{n+1}\rho_{ij}^{n+1} \quad (12)$$

$$C_{ij}^{n+1} = \sqrt{\gamma(\gamma - 1)I_{ij}^{n+1}} \quad (13)$$

(三) 部分网格计算

因受扩张段几何形状限制,并非所有网格微元都是规则的长方形. 每个 I 对应的 $(I, I+35)$ 号网格为一三角形. 对这些三角形网格,引入 $f_{ij}, A_{i-\frac{1}{2}j}, A_{i+\frac{1}{2}j}, A_{i+\frac{1}{2}j}, A_{i+\frac{1}{2}j}$ 等几何参数. 其中 f_{ij} 代表该三角形网格与完全长方形网格面积比值, $A_{i-\frac{1}{2}j}$ 代表网格 (i, j) 和 $(i-1, j)$ 之间流动相互开放的部分与 ΔY 的比值……对本文算例, $f_{ij} = 0.5, A_{i-\frac{1}{2}j} = 0, A_{i+\frac{1}{2}j} = 0, A_{i+\frac{1}{2}j} = 1.0, A_{i-\frac{1}{2}j} = 1.0$.

利用上述几何参数,即可导出对应部分网格的差分方程表达式. 值得一提的是,人工粘性项和质量流动量的计算. 它们和完全长方形网格有所不同. 如部分网格有一边的全体或部分与邻近网格共有,那么这一边对应人工粘性项按全开计算;而如果它对邻近网格完全封闭,那么这一边人工粘性取为(以 $i+\frac{1}{2}j$ 边为例)

$$q_{i+\frac{1}{2}j} = \begin{cases} 2BC_{ij}\rho_{ij}u_{ij} & \text{如 } K(u_{ij}^2 + v_{ij}^2) < (C^2)_{ij} \text{ 且 } u_{ij} > 0 \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (14)$$

质量流动量计算采用

$$\Delta M_{i+\frac{1}{2}j}^u = \begin{cases} A_{i+\frac{1}{2}j} S_j^u \rho_{ij} \bar{u}_{i+\frac{1}{2}j} \Delta t & \text{如 } \bar{u}_{i+\frac{1}{2}j} > 0 \\ A_{i+\frac{1}{2}j} S_j^u \rho_{i+1,j} \bar{u}_{i+\frac{1}{2}j} \Delta t & \text{如 } \bar{u}_{i+\frac{1}{2}j} < 0 \end{cases}$$

$$\Delta M_{i+\frac{1}{2}j}^v = \begin{cases} A_{ij+\frac{1}{2}} S_j^v \rho_{ij} \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}} \Delta t & \text{如 } \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}} > 0 \\ A_{ij+\frac{1}{2}} S_j^v \rho_{i+1,j} \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}} \Delta t & \text{如 } \bar{v}_{ij+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (15)$$

3 计算结果及分析

3.1 计算结果

(一) 初始静止流场

图 2 分别列出各不同时刻对应的等压线分布和 $P-X$ 曲线图. 经过研究,我们可以得出与实验^[10]及激波动力学结果^[9]相符的结论:

(i) 激波未及区域物理参数与初始时刻一致. 即激波只影响其经过区域的流场;激波经过区域物理参数经历突变,波后压力、密度、内能、总能、温度、速度以及音速等均突增一定数值. 这是因为运动激波诱使原来静止的流体质点与其一起向前运动,而原本运动着的流体质点则获得附加速度增量.

(ii) 激波在变截面管道中运动时,其形状由一直线变为一向壁面弯曲的曲线. 不过弯曲的只是临近壁面的一部分;中间仍为平直激波. 这一结论已由实验结果所证实^[10].

随激波不断向前运动,激波起始弯曲点慢慢向中心线靠拢,平直激波变短,激波向二维发展.此时若用一维方法处理激波,误差将逐渐变大.

我们可以画出不同时刻激波起始弯曲点对应坐标 XY 关系曲线图 3. 该曲线为一直线.

(iii) 激波在变截面扩张管道中运动时,运动速度逐渐变低,激波强度减弱. 利用图 2、3 数据,不难算出激波在不同时段上运动的平均速度 \bar{v}_s (表 1).

(iv) 激波运动过后流动定常. 当激波一直向前运动离开扩张管道时,扩张管中为定常的亚音速流场.

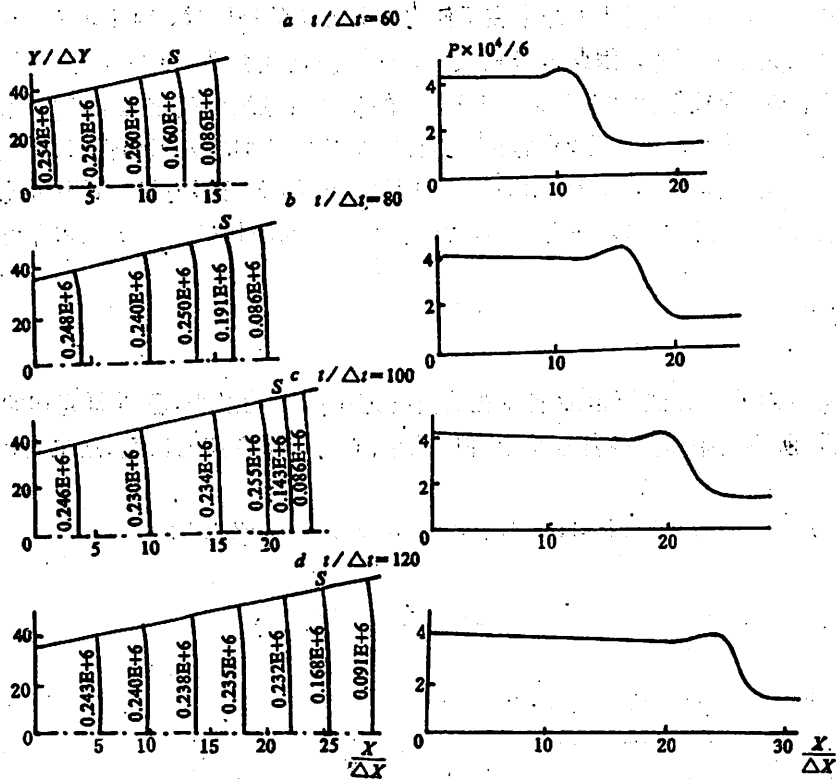


图 2 不同时刻扩张管道(左)和中心轴线(右)压力分布

表 1 激波运动平均速度

$t/\Delta t$	\bar{v}_s (m/s)
60-80	816.31
80-100	687.83
100-120	571.80

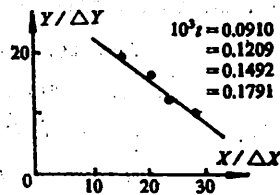


图 3 激波起始弯曲点位置

(二) 初始超音速流场

此时全流场的初始条件可采用膨胀波束简化法或等截面方法进行确定。详细情况可参考文献[11]。

该情形计算结果不理想。尽管激波效应，即激波过后区域物理参数发生突变，有所显示，但激波不能像前述初始流场静止时可以明显观察到，亦即不易看出激波两边本应存在的显著参数变化。

3.2 结果分析

计算结果表明，存在激波被抹平的现象。特别是初始流场为超音速的情形，激波本身的突跃特性几乎被淹没。我们认为缘由在于使用差分方法的极限性。对于本文具体算例，全场 X 方向速度均大于等于零。因此差分格式带来一定的格式粘性。再加上原有差分方程求解中额外的人工粘性，导致粘性效应过冲，差分方程的粘性效应远远超过适当清除激波间断所要求的值，所以激波被抹平。鉴于此，我们在后面计算中减免额外的人工粘性，计算结果有所改进，对静止初始流场尤其如此。但是，对超音速初始流场，结果仍不理想。原因可能与差分格式、人工粘性以及计算方法相关。在另文中，我们将对这一问题作进一步研究和探讨。

4 结束语

本文应用差分方法模拟激波在变截面管道中的运动过程，着重研究初始静止流场情形。总体上讲，所得结果和实验基本符合，但对初始流场为超音速的情况，结果尚待改进。

本文的前期工作得到尹协振副教授的悉心指导，特此表示衷心的感谢！

参 考 文 献

- [1] Kakane A et al., *J. Aerospace Science*, 21(1950), 505.
- [2] Bird G A, *J. Fluid Mech.*, 5(1959), 60.
- [3] Lee J H et al., *Phys. Fluids.*, 8(1965), 2148.
- [4] Russell D A, *J. Fluid Mech.*, 27(1967), 305.
- [5] Lighthill M J, *Proc. Roy. Soc.*, 198(1949), 455.
- [6] Chester W, *Quartly J. Mech. Appl. Math.*, 6(1953), 440.
- [7] Chester W, *Phil. Mag.*, 7(1954), 1293.
- [8] Chisnell R F, *J. Fluid Mech.*, 2(1957), 286.
- [9] Whitham G B, *J. Fluid Mech.*, 2(1957), 145.
- [10] Skews B W, *J. Fluid Mech.*, 29(1967), 297.
- [11] 童秉纲、孔祥言、邓国华, 空气动力学, 高等教育出版社, 北京, 1989, 115.

Numerical Solution of Shocks' Motion in a Section-Changed Shocktube

刘阳梁 翁俊安 翁俊安 翁俊安

Ouyang Liangbiao

(Dept. of Modern Mech.)

Abstract

The finite difference method (FDM) is used in the present paper to solve the two-dimensional fluid flows for the case of shock's motion in a section-changed shocktube. Two kinds of fluid flows are investigated, which correspond to the static and supersonic initial flow conditions respectively. Numerical results are analysed and compared with existing experimental ones.

Key words: section-changed shocktube, shock, finite difference method (FDM), Euler equation

高精度电感式外径检测仪

李智群 陈岭丽⁺ 沈兰荪 王英英⁺

(无线电电子学系)

(⁺精密机械与精密仪器系)

摘 要

本文研制的高精度电感式外径检测仪采用二个电感传感器,能自动显示各种轴套的外径、平均直径和圆柱度。文中介绍了仪器的工作原理与软硬件设计。

关键词: 外径检测,人机接口,电感传感器

中图法分类号: TH711

1 引言

在工厂里通常用螺旋百分尺或游标卡尺来进行外径的检测。在大批量检验时,检验员劳动强度大、工作效率低,常因测量精度与操作熟练程度有关影响了检验质量。为了提高劳动生产率,把好质量检验关,受工厂委托我们研制了这台高精度电感式外径检测仪。

该仪器是以单片机为核心的智能检测仪器,用于检测各种轴套的外圆直径、平均直径和圆柱度。使用二个电感测头,同时在一条母线上的二个不同点进行测量,当直径超差时便发出报警。这种组合式的测量仪器国内未见报道。仪器的测量范围为 $D \pm 100 \mu\text{m}$ (D 为标准件直径),显示分辨率为 $1 \mu\text{m}$ 。如果更换机械配件和相应的软件,便可用于其他各种零件的长度测量;如果配上其他的传感器又可用于各种物理量(压力、转速、温度等)的测量。

2. 测量原理

电感式外径检测仪的系统组成如图1所示。

电感传感器测量精度高、稳定性好、输出功率大,在精密长度计量中是一种较为理想的位

移传感器[1]

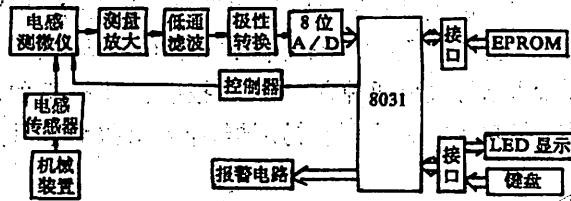


图1 电感式外径检测仪原理框图

检测仪有 A、B 两个传感器，采用接触式测量。A、B 两个传感器的工作状态及采样顺序分别由单片机通过控制器来进行控制。

图 2 为机械装置示意图。本机械装置可在径向和轴向分别进行调节，调节范围为 0—25mm，因此只要更换 V 型铁，便可测量不同直径不同长度的轴套。

两个传感器平行放置，测量轴套上同一条母线上的不同位置。

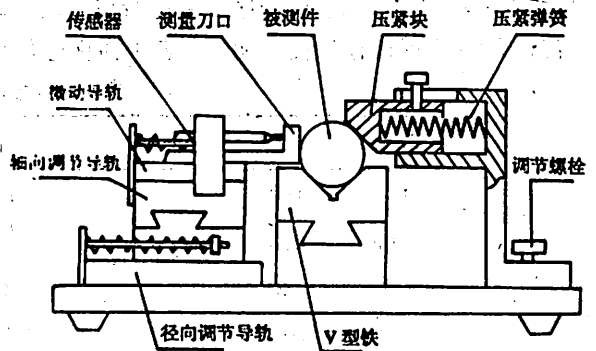


图2 机械装置示意图

3 硬件电路

硬件电路部分包括测量放大、低通滤波、极性转换、A/D 转换、EPROM、LED 显示及报警电路。为了保证测量的高精度，测量放大器采用典型的差分放大器，使其具有高共模抑制比、高输入阻抗和良好的线性度^[2]。

A/D 转换器采用逐次逼近型的 8 位 A/D 芯片 ADC0804。图 3 示出 A/D 转换器与 8031 接口电路。

图中 R_1 、 C_1 给 ADC0804 提供时钟信号，时钟频率为 $f_{CLK} = 1/1.1R_1C_1$ 。 R_2 、 R_3 将双极性信号转换为单极性信号，即将 V_i ($-5 \sim +5V$) 转换为 V_i ($0 \sim +5V$)。当 $R_2 = R_3$ 时， $V_{in}(+) = V_i = \frac{1}{2}(V_i + 5)$ 。

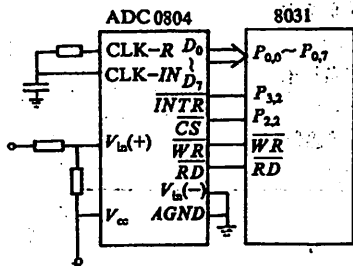


图3 A/D转换器与8031接口电路

当 \overline{CS} 、 \overline{WR} 同时有效时(低电平)，则启动 A/D 转换器，并置 \overline{INTR} 为高电平。A/D 转换结束时， \overline{INTR} 信号变为低电平。因此 \overline{INTR} 信号可作为 8031 的中断请求信号或查询信号。当 \overline{CS} 、 \overline{RD} 同时有效时(低电平)，则读取转换结果数据。

8031 内部有 128 字节的 RAM, 系统又扩展了一片 8155, 这样共有 384 字节的数据 RAM^[3], 已足够系统使用. 由于 8031 内部无程序存贮器, 系统中使用了一片 2764, 扩展 8K 字节的程序存贮器.

检测仪器与用户之间的人机接口是通过键盘和显示器实现的. 用键盘输入参数、命令, 控制其完成用户指定的操作. 显示器显示提示信息、数据和检测结果等.

报警采用声音报警和指示灯报警两种方式, 声音报警利用 8155 的定时器产生多种频率的振荡信号作为报警信号, 经功率放大后驱动扬声器, 指示灯报警采用发光二极管, 由 8031 的 I/O 口线控制.

4 软件设计

8031 内部 RAM 的 20H-2FH 为位寻址区, 位地址范围为 00H-7FH. 位寻址的每一位都可以视为一个软件开关, 由程序直接进行位处理. 通常把各种程序状态标志, 位控制变量设在位寻址区内, 使程序设计简单明了. 表 1 为标志位设置表.

表 1 标志位设置表

标志位	位地址	意义描述
START	00H	开始检测? 0—N, 1—Y
BJIAO	01H	标准件校正? 0—N, 1—Y
EJIAO	02H	校正完毕? 0—N, 1—Y
EXEJ	03H	正在进行检测? 0—N, 1—Y
CONJ	04H	参数提示符与对应数值标志 0—数值, 1—参数提示符
SIGNJ	05H	正负号标志? 0—“+”, 1—“-”
CHAOJ	50H	超出电压范围? 0—N, 1—Y
FINEJ	51H	合格? 0—合格, 1—不合格
ERRSIGNA	60H	A 传感器校正误差符号 0—“+”, 1—“-”
ERRSIGNB	61H	B 传感器校正误差符号 0—“+”, 1—“-”
FIRST	65H	第一点相对距离正负标志 0—“+”, 1—“-”
SECOND	66H	第二点相对距离正负标志 0—“+”, 1—“-”
CHANNEL	62H	传感器标志 0—A 传感器 1—B 传感器

图 4 为电感式外径检测仪监控软件流程图.

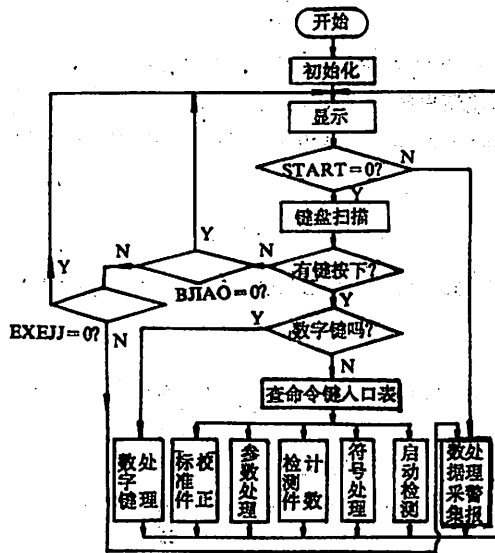


图4 监控软件流程图

5. 试验结果

本仪器采用比较法进行接触式测量。

每次开机后先对一标准圆柱件进行测量，以确定零位，然后再对工件进行测量。测量点数视工件误差性质来确定，我们所测的工件误差为不柱度(圆锥形)误差，因此只需测两次，两点互为 90°，则其不柱度为两次测量的均值：

$$[(\delta A_1 - \delta B_1) + (\delta A_2 - \delta B_2)]/2$$

其平均直径： $D + \frac{\delta A_1 + \delta B_1 + \delta A_2 + \delta B_2}{2}$

这里， δA_1 —A 测头的第一次测量值

δB_1 —B 测头的第一次测量值

δA_2 —A 测头的第二次测量值

δB_2 —B 测头的第二次测量值

我们进行了多次试验(温度变化范围在 10℃ 以内)，连续运行 15h 以上，仪器的零点漂移在 0.5μm 以下。同时我们采用了微米级精度的扭簧表及一级块规来对仪器的测量误差进行标定。标定结果：其测量误差 ≤ 1.5μm。现在这台仪器已投入生产现场正式使用，性能稳定可靠。由于该仪器对环境温度要求不太高，在室温下均可使用，操作简单，因此很适用于一般条件的车间产品检验室使用。

参加此项研制工作的还有韦晓岩、戴旭初、朱农、蔡震雷等同志。

参 考 文 献

- [1] 严钟豪、谭祖根, 非电量电测技术, 机械工业出版社, 1985, 94.
 [2] 沈兰荪, 数据采集与处理, 能源出版社, 1987, 74-94.
 [3] 孙涵芳、徐爱卿, MCS-51, 96 系列单片机原理及应用, 北京航空航天大学出版社, 1989, 156.

High Precision Inductance Outer Diameter Detector

Li Zhiquan Chen Lingli⁺ Shen Lansun Wang Yingying⁺

(Dept. of Electronics)

(⁺Dept. of Precision Machinery and Instrument)

Abstract

This paper introduces an outer diameter detector, using two inductance sensors. It can automatically display the outer diameter, average diameter and cylindricity of all kinds of shafts and sleeves. The principle of this system and the design of hardware and software are discussed.

Key words: outer diameter detector, man-machine interface, inductance sensor

用于介形类化石识别及岩芯分析 的人工神经网络方法

林文 陈学俭

(无线电电子学系)

摘 要

介绍了在石油勘探中用于识别介形类化石及分析岩芯图象的人工神经网络方法. 讨论了以Hopfield网络为基本模型的加深联想记忆神经网络及加速的反向传播模型(Back-Propagation Model), 将其应用于介形类化石的识别获得了很好的效果, 并成功地实现了岩芯中的空隙分析.

关键词: 图象处理, 模式识别, 人工神经网络

中图法分类号: TP391

1 引言

在石油勘探中, 正确分析介形类化石在地层中的分布规律, 对于细分地层, 尤其是在盆地内进行区域地层对比有着十分重要的意义^[1]. 另外对地下岩石状况的分析也有助于判断出油情况, 岩石中的空隙分析便是其中一种有效的途径.

介形类化石体积小、数量大、品种多, 在放大镜或显微镜下用人眼一个个地将其识别, 无疑是非常繁重的工作. 采用计算机图象处理与识别的方法来实现识别分类显然是十分必要的. 同样计算机岩芯分析也是非常有效的.

我们曾用传统的模式识别方法对介形类化石进行过分类识别, 收到了一定的效果. 但是不仅复杂费时, 而且对一些有缺损的化石难于识别. 八十年代兴起的人工神经网络方法, 用非线性的网络模拟真实的神经系统的处理, 开辟了一个很有前景的新领域.

本文从图象分析识别的角度根据实际应用的要求, 研究了适合介形类化石识别及岩石中空隙分析的人工神经网络方法. 与传统的模式识别方法的比较表明, 人工神经网络方法具有明显的优越之处.

2 加深记忆的 Hopfield 模型用于介形虫识别

Hopfield 网络是一种互连网络,它由相互连接的神经元组成,记忆存储在各个神经元之间的连接强度上^[2].这样克服了传统技术的某些障碍,在速度及容错性方面均有较好的效果.本文采用了基本结构如图 1 所示的 Hopfield 网络,

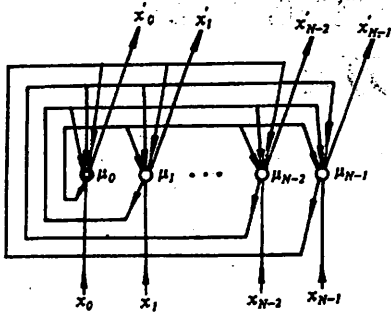


图 1 存储器的 Hopfield 网络

μ_i 为神经元的状态, w_{ij} 表示第 i 个神经元与第 j 个神经元的连结强度. 输入 x_i 和输出 x_i 都是二值函数 +1 或 -1. 每个节点的输出通过权重反馈到除本节点以外的所有节点. 从 t 时刻到 $t+1$ 时刻有

$$\mu_i(t+1) = f\left(\sum_{j \neq i} w_{ij} \mu_j - \theta_i\right)$$

其中 f 为严格限幅函数. θ_i 为第 i 个神经元的门限值.

当网络对称,即 $w_{ij} = w_{ji}$ 时,引入“计算能量”函数 E ,

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} w_{ij} x_i x_j + \sum \theta_i x_i$$

改变神经元 i 的状态 Δx_i , 网络能量改变为

$$\Delta E = \Delta x_i \frac{\partial E}{\partial x_i} = -\left(\sum_{j \neq i} w_{ij} x_j - \theta_i\right) \Delta x_i$$

可见 $\Delta E \leq 0$, 能量函数在网络动态过程中单调下降, 且有界. 因此系统趋于稳定态.

理论分析与实验表明, Hopfield 模型主要存在两点局限: (一) 网络能够存储并正确联想的样本数量有限. (二) 如果一个样本与另一个样本有许多相同的存储单元, 那么这个样本不稳定. 要提高 Hopfield 网络的联想记忆效果, 就必须对原网络进行改进.

能量函数 E 在 w 空间的吸引子不仅包括记忆样本, 也有非记忆吸引子, 要保证恢复出记忆样本, 就必须加深样本吸引子, 使该点能量更小, 这就需要对能量函数加以修改.

模拟人的反复记忆, 多次加深印象的现象, 采用权重修改公式

$$\begin{cases} w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \eta x_i(t) x_j(t) & \left| \sum w_{ij}(t) x_i(t) \right| < \theta \\ w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) & \left| \sum w_{ij}(t) x_i(t) \right| \geq \theta \end{cases}$$

此处 θ 为各种神经元的门限, η 为学习速率. 当对所有的样本, 权重 w_{ij} 都不再改变时, 则认为学习结束.

这种联想网络基本上能够保证运行到稳定的样本吸引子状态.

介形类化石识别系统的框图如图 2 所示.

采用加深记忆的 Hopfield 模型, 将 22×13 的二值化数字图象作为样本, 学习过程中经过 16 次迭代权重收敛. 确定了网络权重后, 输入未知的介形虫样本, 能获得正确的识别. 对于有缺

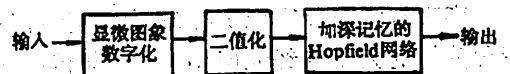


图 2 介形类化石识别系统框图

损的样本,网络依靠残缺的输入经联想记忆过程,仍可识别出来并恢复其本来面貌.收到了较满意的效果.

3 用 B-P 模型分析井下岩石的显微图片

岩石显微图片是将井下取出的岩芯注入染色液后在显微镜下拍摄而得.分析岩石结构有助于判断出油的可能性,有时一年有几千张岩石图需要分析,因此迫切要求用计算机进行自动处理.本文主要研究岩石中空隙的情况,这是研究岩石的手段之一.

由于注入了染色物质,空隙处呈现特定的颜色(黄色),而岩石由于成份不同有白、兰、褐、灰、黑各种颜色.将彩色图片数字化为 R, G, B 三种彩色分量的数字化图,分别作为三个特征矢量,进行模式分类.

反向传播模型(Back-Propagation Model)简称 B-P 模型在模式分类方面具有良好的特性^[3]. B-P 模型是一个以单层感知机为基础的多层网络模型,它的学习方法是利用梯度搜索的方法把误差从输出层向输入层反向传播,修改连接权重.反向传播模型实现了一个输入域到另一个输出域的非线性映射.每一个单元的计算都相同且不复杂,但组成多层网络后,简单的非线性函数经过多次复合就变成一个具有很强功能的复杂系统,几乎可以实现任意输入到输出的映射,这是一般线性系统所不及的. B-P 三层模型如图 3 所示.

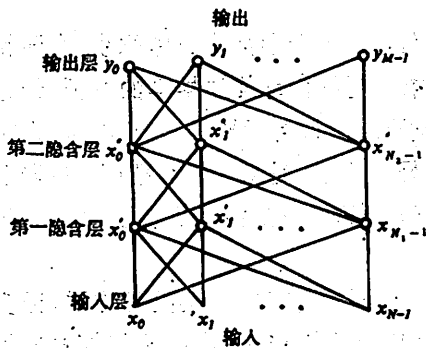


图 3 反向传播网络

$$其中 y_l = f\left(\sum_{k=0}^{N_2-1} w_{lk}x''_k - \theta_l\right) \quad 0 \leq l \leq M-1$$

$$x''_k = f\left(\sum_{j=0}^{N_1-1} w'_{kj}x'_j - \theta'_k\right) \quad 0 \leq k \leq N_2-1$$

$$x'_j = f\left(\sum_{i=0}^{N-1} w_{ij}x_i - \theta_j\right) \quad 0 \leq j \leq N_1-1$$

反向传播网络利用广义 δ -规则进行学习,非线性函数取 S 形函数

$$f(x) = 1/[1 + \exp(-x)]$$

每一单元的输出

$$O_{ij} = 1/\{1 + \exp[-(\sum w_{ij}O_{ik} + \theta_j)]\}$$

对于输出层单元的误差信号为

$$\delta_{ij} = (d_{ij} - O_{ij})O_{ij}(1 - O_{ij})$$

式中 d_{ij} 为期望输出, O_{ij} 为实际输出. 对于隐藏层单元

$$\delta_{ij} = O_{ij}(1 - O_{ij}) \sum_k \delta_{ik} w_{ik}$$

其中 k 为处于比单元 j 高的层次中的单元,有时若增加一个时间项,平滑权重的变化,收敛会快些. 采用以下公式

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \eta \delta_{ij} O_{ij} + \alpha [w_{ij}(t) - w_{ij}(t-1)]$$

其中 $0 \leq \alpha \leq 1$. 对于 θ_j 有同样的调整公式

$$\theta_j(t+1) = \theta_j(t) + \eta \delta_{ij} O_{ij} + \alpha [\theta_j(t) - \theta_j(t-1)]$$

η 为学习速率, η 过小学习太慢, η 过大会使网络跨过极小值, 产生振荡, 因此 η 的最佳选择为不至于产生振荡的最大值. 对于含混度大的数据分类, 学习速率不能快, η 要定得小, 但是过小了收敛太慢. 为较好地确定 η , 提高收敛速度, 采用了加速 B-P 模型收敛方法. 即在一个模式学习完后并不修改权重和门限, 而是在所有的模式都学完后, 用全体模式的总误差来修改权重和门限值. 当某次迭代误差比前次大时, 宣告这次学习失败, 放弃原来修正的权重和门限值. η 不再作为常数, 通常先置 η 为 0.1 左右, 每当学习成功, η 乘上一个大于 1 的常数作为下一次学习的新 η 值, 而当某次学习失败, η 乘上一个小于 1 的常数, 并把平滑因子 α 置为 0, 直到学习成功为止. 这样加快了收敛速度.

采用 B-P 模型的岩石分析步骤如下:

把一彩色的岩石显微图片数字化为 R, G, B 三幅 256×256 的数字图, 作为 B-P 模型的输入, 经分析表明, 采用三层网络分类可以一次完成空隙分类, 所以用 B-P 三层模型, 输出即为分类结果. 然后再具体计算空隙所占百分比、连通性等等.

这里正确选择训练区是十分重要的, 由于实际岩石图片情况比较复杂, 各块边缘与内部彩色不一, 具有散在噪声点存在, 因此训练区要有代表性. 本文采用了计算各类中心距离后随机取点的方式, 使分类精度进一步得到提高. 与 K-mean 分类的结果作比较, 分类精度从 83% 提高到 95%. B-P 三层模型还能实现一次分类成功.

4 结束语

综上所述, 人工神经网络方法在图象分析中有独到之处. 由于介形类化石体积小, 表面粗糙, 甚至有缺损, 识别比较困难. 采用特征分析的方法, 要求广泛细微地描述样本的特征, 经过许多步骤才能识别出一些介形虫化石样本, 而对于有缺损的或形状相近的则很难识别. 人工神经网络的方法采用联想记忆过程, 对残缺的样本也能较好的识别, 提高了分类精度. 在岩芯显微图片的分析中识别率比 K-mean 分类提高了 12%. 实验表明, 该方法优于传统的图象识别方法.

本文叙述的石油勘探中介形类化石识别及岩芯的空隙分析的计算机自动处理方法, 证实了人工神经网络方法在石油勘探方面实际应用的可行性及广泛前景. 亦为物探系统模式分类提供了新的方法.

以上工作是在 VAX8700, VAX750+Model75 图象处理机上实现的. 信息中心图像处理实验室已有的软件工作为本项研究创造了良好的条件. 本文的完成与实验室许多同志的帮助是分不开的, 在此一并致谢.

参 考 文 献

- [1] 大庆油田开发研究院, 松辽盆地白垩纪介形类化石, 科学出版社, 北京, 1976, 14-19.
- [2] Lippmann R P, *IEEE ASSP Magazine*, Apr. 1987. p. 4-22.
- [3] Vogl T P, Mangis J K, Rigler A K, Zink W T. and Alkon D L, *Biological Cybernetics*, 59(1988), 257-263.

The Artificial Neural Network Method in Analysis Mussel-Shrimp Fossil Recognition and Core Analysis

Lin Wen

Chen Xuequan

(Department of Radio and Electronics)

Abstract

In this paper, artificial neural net methods are introduced for use in two aspects of petroleum prospecting—the recognition of mussel-shrimp fossils and the analysis of core images. The deeper associative memory based on Hopfield net and the accelerating back-propagation model are discussed. The former is applied to recognize mussel-shrimp fossils with very good results, and the latter is used to successfully realize the analysis of gaps in core. The result of the experiment indicates that the artificial neural net method is superior to the traditional model-recognition method and has vast prospects in image analysis.

Key words: image processing, pattern recognition, neural networks

谐振梁式测力传感器动态参数识别

王琪民 张培强⁺ 唐新鲁⁺ 马薇

(精密机械与精密仪器系)

(⁺近代力学系)

摘 要

用光通量变化法非接触地记录了小型谐振式力传感器中的谐振梁的自由响应信息,并根据多点同时采集的时间域信号,利用时间域系统识别技术,进行了结构动态参数的识别.还与全息时间平均法、声测法进行了对比.结果分析表明三种方法测量的梁的前几阶固有频率一致,振型相近,并从识别的阻尼比中计算出了谐振梁的 Q 值.

关键词: 谐振式传感器,实验模态分析,参数识别

中图分类号: O329, O348. 11

1 前言

谐振式测力传感器具有结构简单、灵敏度高、重复性好、不需要A/D变换等优点^[1].它易于与微机组合成高精度的测控系统,近年来发展很快.

设计这种传感器,首先要确定当轴向力 $F_x=0$ 时的固有频率 f_0 ;其次,为使谐振梁功耗低,选频能力好,放大电路设计简单,要求高 Q 值的振子;另外,还需根据隔振原理去设计梁的端部支承结构,以减少梁与外部结构的能量交换;最后,还要了解梁的各阶振型(节线位置)以确定合适的激励位置.因此确定梁的固有频率、阻尼比和振型等动态参数是设计传感器的关键.

一般常用的振动测量方法是电测法,即用测振传感器将振动量变成电量,然后处理这些电信号,可得到系统的动态参数.但对于小型结构的测量,传感器附加质量对系统的动态参数将带来较大影响.其结构越小,影响越大,测得的系统动态参数就越失真.而我们要测的谐振梁式传感器的梁为 $40 \times 2 \times 1\text{mm}^3$,材料为铝合金(中国科学院智能所试制),质量很小.为了得到

1991年5月30日收到.

* 国家自然科学基金资助项目.

这种小型或微小型物体的准确的动态参数,必须采用一种不干扰系统特性的无接触测量法.

光测法是常用的非接触测量法,如时间平均法、频闪法、散斑线纹图法等,但这些方法都是测稳态振动,失去了时间历程信息.

本文利用光通量变化法记录了谐振梁离面振动的自由响应信息,并用全息时间平均法及声测法与其进行了比较,较好地识别了系统的动态参数.

2 谐振式力传感器的原理

待测的小型力传感器是由智能所初步设计加工成的,其结构如图 1 所示.

铝制传感器的矩形截面梁谐振子尺寸为 $40 \times 2 \times 1 \text{mm}^3$,梁的一端与支承架固接,另一端与宽 2mm、厚 1mm 的细横梁相接,梁的中部粘有 $1.5 \times 1.5 \text{mm}^2$ 的压电晶体,端部粘有长度 2mm 的应变片,横梁与支承架相接,其中央有耳状突起,其上小孔为轴向力施力点,①、②、③、④为测量点位置.

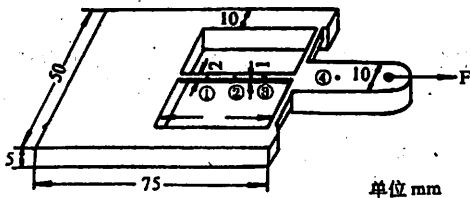


图 1 小型力传感器结构图

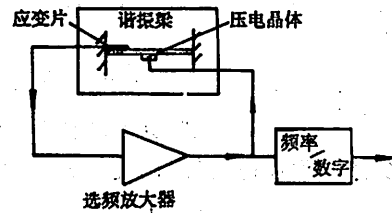


图 2 谐振式力传感器原理图

梁振动的固有频率被轴向力调制,梁的振动经应变片输出至选频放大器,再通过压电晶体激励梁,即梁的振动由选频放大器来维持,而选频放大器又受被测量量所控制,这就构成一个正反馈自激振荡系统,输出为频率信号.固有频率的变化反应了轴向力变化,见图 2.

在轴向力 F_x 作用下的梁的固有频率 f 的计算公式:

$$f_i = f_{i0} (1 + K_i F_x)^{1/2}, (i = 1, 2, 3, \dots) \quad (1)$$

其中 f_{i0} 为轴向力 $F_x = 0$ 时梁的第 i 阶固有频率; K_i 为系数,由梁的材料、几何参数、边界条件而定; f_i 为轴向力作用下的第 i 阶固有频率.

3 谐振梁动态参数的识别

由于梁的结构极轻,梁重约 0.22g,可安装面积很小(梁宽 2mm).我们采用非接触式光通量变化法进行了测量,并用全息时间平均法、声测法进行了比较.

(一) 光通量变化法

激光光束经光栅分光后,将其中两光点用透镜聚焦照射在梁上两点,将这两点的反射光再聚焦分别照射在两个光电倍增管前面带有小孔的屏上.此时屏上的光斑可以近似认为是爱里斑(Airy)^[2],斑的大小约 1~1.5mm,而屏上小孔的直径约为 0.5~0.8mm.光电倍增管由高压源供电,它的输出端直接输入频谱分析仪,见图 3.

调节小孔与光斑的相对位置,使得梁静止时,光电倍增管只有直流输出.当用小锤轻轻敲击传感器时(此时不用压电晶体激振),如敲击时间足够短,可认为梁受一个脉冲激励,其

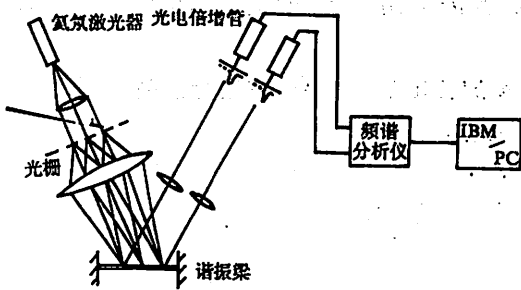


图 3 光通量变化法实验方框图

频谱很宽,能复盖梁的前几阶固有频率.此时梁的振动幅值(微米数量级)引起反射光点的位置变化,经透镜放大后,使得落在屏上光斑与小孔的相对位置变化,经小孔进入光电倍增管的光通量发生变化.由于爱里斑中央主极大,占光斑光强的 84%,各次极大光强可忽略不计.只要敲击力度适当,振动幅值与光通量变化就呈线性关系,频谱仪上分别记

录了这两点如①、②点的自由响应的时间历程,继而分别记录②、③和③、④点,并以其中一点,如第①点,为基准进行归一.将这些模拟信号经 A/D 变换输入计算机.在计算机处理以前,已进行了静态标定,即用微动平台给出一个标准位移,测出电信号变化,给出灵敏度.标定精度可达微米级.

根据张培强等人提出的单次激励与多次单激励空间时间回归法(S-STRM, MS-STRM)^[3],进行时间域模态参数识别,其原理简单推导如下:

从线性振动理论得知,解几个自由度系统自由响应的递推公式

$$x_i(k) = - \sum_{q=1}^l \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j(k-q), i=1,2,\dots,n; k=l+1, l+2, \dots, l+m \quad (2)$$

其中 n 为测量点数, m 为采样点数. 方程表示任一测点 i 在 k 时刻的响应取决于 n 个测点在 k 时刻前 l 个采样值, a_{ij} 为空间—时间回归系数, 写成矩阵形式:

$$\{x(k)\} = - \sum_{q=1}^l A^q \{x(k-q)\} \quad (3)$$

其中, $\{x(k)\} \in R^{n \times 1}$, $A^q \in R^{n \times n}$. 以上方程给出了任一选定的激励位置, 单一激励所产生的 n 个测量点的自由响应, 用最小二乘法求解单一激励下的系统矩阵 A^q , 以此作为识别的基础, 称之为单激励空间—时间回归方法.

设 p 为激励的总次数, 则多次单激励空间—时间回归方程可写成:

$$[\{x^1(k)\} \{x^2(k)\} \dots \{x^p(k)\}] = - \sum_{q=1}^l A^q [\{x^1(k-q)\} \{x^2(k-q)\} \dots \{x^p(k-q)\}] \quad (4)$$

由模态理论知

$$\{x(k)\} = \begin{Bmatrix} x_1(k) \\ x_2(k) \\ \vdots \\ x_n(k) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \psi_{11} & \psi_{12} & \dots & \psi_{1n} \\ \psi_{21} & \dots & \dots & \psi_{2n} \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ \psi_{n1} & \dots & \dots & \psi_{nn} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} e^{\lambda_1 k \Delta} \\ e^{\lambda_2 k \Delta} \\ \vdots \\ e^{\lambda_n k \Delta} \dots \end{Bmatrix} \quad (5)$$

其中, Δ 为采样间隔, $\Psi = [\psi_{ij}]$, $i, j=1, 2, \dots, n$ 为系统矩阵的特征向量; $\lambda_i, i=1, 2, \dots, n$, 为系统矩阵的特征值. 将(5)代入(4)式得

$$\sum_{q=0}^l A^q \Psi \begin{Bmatrix} e^{\lambda_1(t-\tau)A} \\ e^{\lambda_2(t-\tau)A} \\ \vdots \\ e^{\lambda_{POE}(t-\tau)A} \end{Bmatrix} = 0 \quad POE = 1, 2, \dots, P \quad (6)$$

其中 A^0 为单位矩阵, $A^q (q=1, 2, \dots, l)$ 为空间-时间回归系数矩阵, POE 为激励位置。

从方程(4)中解出 A^q , 从而得到含有多激励信息的系统矩阵 $A^q [A^0, A^1 \dots A^l]$, 系统模态参数由解特征值问题决定。

(二) 全息时间平均法

用信号发生器的正弦信号去激励粘在传感器梁上的压电晶体, 当调整激振频率使其等于梁的某阶固有频率时, 梁发生共振(可用应变片输出电信号, 经频率分析仪监测)。此时拍摄全息图, 并使曝光时间远远大于振动的周期, 干板上就记录下时间平均全息图, 显、定影处理后, 在参考光照射下, 再现为传感器的原始像, 并在梁上附有干涉条纹, 即等振幅线。根据推导, 黑条纹满足公式^[4]

$$W(x) = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{\alpha_i}{\cos\theta_1 + \cos\theta_2} \quad i = 1, 2, 3, \dots, 0 \quad (7)$$

这里, λ 为激光波长, α_i 为零阶 Bessel 函数的根, θ_1, θ_2 分别为照明与观察方向与梁的法线的夹角, $W(x)$ 为梁上 x 点的离面位移。由公式(7)可算出梁上各点振幅值。光路安排见图 4, 算出的振型图为图 5。

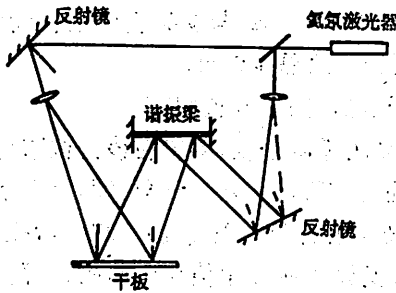


图 4 全息时间平均法光路图

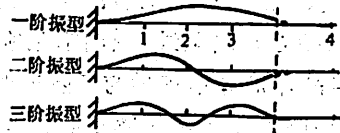


图 5 谐振梁振型示意图

(三) 声测法

用白噪声激励压电晶体, 因白噪声频谱宽, 足以复盖梁的前几阶固有频率。用极柱体话筒做拾振器(直径 $\phi 8$), 由振动产生的声压变化转换成电信号, 经前置放大, 输入频谱分析仪, 可测出响应频谱。实验方框图为图 6。

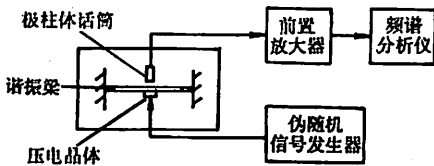


图 6 声测法实验方框图

4 结果与讨论

表 1 给出的是三种方法测量谐振梁的前三阶固有频率和部分阻尼比值。图 5 为全息时间平均法测得梁前三阶振型示意图。

表 1 测量结果

参数	光通量 变化法	全息时 间平均法	声测法	
一阶	f_1	2.6kHz	2.7kHz	2.6kHz
	ζ_1	0.01	—	—
二阶	f_2	9.0kHz	8.9kHz	2.6kHz
	ζ_2	0.01	—	—
三阶	f_3	17kHz	17kHz	17.8kHz
	ζ	—	—	—

(i) 三种方法测得的固有频率一致、振型相近。全息法优点是全场、直观、光路排好后, 拍摄简单, 但只能测稳态响应; 声测法灵敏度高, 但易受环境噪音影响, 且话筒直径不够小, 测点精度较低; 光通量变化法用敲击激励无附加质量和刚度, 可记录自由振动的时间历程信息特别适合测微小物体, 精度也较高, 缺点是技术上要调节小孔与光斑的相对位置, 要选择适当的敲击位置、敲击力度和敲击方式, 且多点测量增加了工作量。

(ii) 在用光通量变化法测量时, 敲击后响应频谱除了表上列出的各阶固有频率外, 还有 800Hz 的频率。经与理论计算比较与分析, 我们认为这不是梁的固有频率, 而是支架整体振动的固有频率。由隔振理论可知, 当梁做一阶主振动时 ($f_1 = 2.6 \times \text{kHz}$) 与支架整体主振动频率比为 $2.6/0.8 = 3.25$, 根据振动理论大于 2.50 时, 可达到较好的隔振效果。

(iii) 梁的一阶、二阶阻尼比 ζ 均为 0.01, 说明梁的机械品质因子 Q 值很高。

(iv) 从全息一阶振型图上看, 梁与支架固接处是最亮的零阶条纹, 即梁在该处位移为零, 而梁与横梁联接处是暗条纹, 说明横梁刚度小, 梁在此处有位移。全息二阶全息图上无条纹, 这是因为压电晶体恰好粘在梁的二阶振型的节线处, 激励与梁的振型正交, 激不出二阶振型的缘故, 二阶振型图是以压电晶体中心为节线, 参照光通量变化法所测幅值比画出的; 三阶全息图上有两条亮线为三阶主振动的节线, 但节线与各条纹均与梁的主轴线不垂直, 这是由于粘接时压电晶体的中心未与梁的主轴线重合的缘故。

(v) 三种方法测量结果为校核已有传感器进一步改进设计提供了依据。以上三种方法, 特别是光通量变化法对通过测量离面位移而进行的小型或微小物体动态参数识别提供了一种有效途径。

参 考 文 献

- [1] Blam F R *et al.*, *Sensors and Actuators*, 17(1989), 513—519.
- [2] 麦伟麟, 光学传递函数及其数理基础, 国防工业出版社, 1978; 238—246.
- [3] Huang T C, Zhang P Q, Feng W Q, *The Journal of Analytical and Experimental Modal Analysis*, 1(1986), No. 4, 1—7.
- [4] R. J. 科利尔, C. B. 伯克哈特等著(美), 盛尔镇、孙明经译, 光全息学, 机械工业出版社, 1983; 410—415.

Dynamic Parameter Identification of Resonator Force Sensor

Wang Qimin Zhang Peiqiang⁺ Tang Xinlu⁺ Ma Wei

(*Dept. of Prec. Mach. and Instrum.*)

(*+Dept. of Mod. Mech.*)

Abstract

The method of luminous flux change is used to record the free response of the resonating beam in the small resonating beam force sensor by Non-contact measurement, and in terms of the time domain signals collected simultaneously at the multiple points. System identification techniques are used in the time domains to identify the dynamic parameters. Furthermore, time-averaging holography and sound identification method are employed to identify the dynamic parameters. The results of the lower-order natural frequencies and modes are quite consistent. The results not only provide a basis for sensor design but also prove that the three methods are efficient ways to identify dynamic parameters of small or mini-small objects.

Key words: resonating force sensor, experimental model analysis, parameter identification

$\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体的生长、结构及光谱性质

姚连增 程庭柱⁺ 阮耀钟 张裕恒⁺

(材料科学与工程系) (+结构成分分析中心)

摘 要

用助熔剂缓冷法培养出化学计量比的发光单晶体 $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 。该晶体属四方晶系, $I4_1/a$ 空间群, 晶胞参数为 $a=11.437 \text{ \AA}$, $c=11.336 \text{ \AA}$, $c/a=0.991$ 。测定了该晶体室温下的反射光谱、激发光谱及荧光光谱。观察到 Ho^{3+} 离子的 $^5S_2-^5I_8$ 跃迁的强黄绿色荧光发射。

关键词: 发光晶体, $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体光谱, 稀土, 助熔剂法。

中图分类号: O782.4

1 前言

近二三十年来,不少人对 $\text{Ho}^{3+}:\text{YAG}$ 、 $\text{Ho}^{3+}:\text{YAP}$ 及 $\text{Ho}^{3+}:\text{LiYF}_4$ 等晶体^[1-3]以及 Ho^{3+} 离子在其它基质^[4,5]中的光谱性质与激光行为进行了较多的研究。近来又有人在 110K 温度下,实现了 Ho^{3+} 离子 $^5I_6-^5I_8$, $^5S_2-^5I_5$, $^5I_7-^5I_8$ 跃迁的激光输出和在 300K 温度下 $^5I_6-^5I_7$ 跃迁的激光输出^[6]。但至今还未见到有关 $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体的光谱性质和光谱强度参数的详细报道。

自 1987 年以来,我们对稀土多钨酸盐发光晶体的生长条件和光谱特性进行了较系统的研究^[7-9]。本工作是在已有工作的基础上,继续研究不同稀土元素的 $\text{Na}_5\text{RE}(\text{WO}_4)_4$ 晶体的光谱性质(RE 为稀土元素),旨在寻找更优良的发光晶体。

2 晶体生长

2.1 粉末材料制备

采取与文献[7]相类似的方法,即可得到浅黄色粉末沉淀物。烘干,研细。X 射线物相分析

证明,浅黄色粉末即为 Na₅Ho(WO₄)₄.

2.2 晶体生长

差热及 X 射线衍射分析表明,Na₅Ho(WO₄)₄ 晶体为非一致熔化合物,采用助熔剂缓冷法生长是合适的. 助熔剂选用 Na₂WO₄. 控温系统由 H851 型微电脑温度程序设定仪与 DWT-702 控温仪联机组成. 实验发现,在 740-730℃ 是晶核形成并长大的关键时期,为给析出的晶核以恒温生长的环境并有足够的时间长大,可在此期间停止降温或采用较低的降温速率(~0.3℃/hr).

最后,可得到许多淡黄色的 Na₅Ho(WO₄)₄ 单晶体颗粒,由于成核数目较多,致使每一晶粒的发育受到影响,除个别晶粒具有片状或规则的多面体外形外,多数晶粒的外形变得很不规则,但透明度均很好,其中最大晶粒尺寸可达 3×3×2mm³. X 射线分析证明为单晶体,正交偏光显微镜下没有观察到晶体中因应力和杂质引起的双折射及生长条纹,但有少量散射颗粒存在. 实验装置图示于图 1.

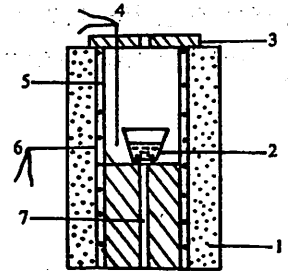


图 1 实验装置示意图

- 1. 保温层 2. 坩埚
- 3. 隔热板 4. 测温热偶
- 5. 加热器 6. 控温热偶
- 7. 通气孔

3 结构与光谱特性

3.1 晶体结构

用日本理学电机 D/max-rA 型转靶 X 射线衍射仪 Cu 靶 K_{α1} 辐射(λ₀₁=0.15405nm), 在 2θ 角为 10°-70° 范围内扫描, 得到 Na₅Ho(WO₄)₄ 单晶的 X 射线衍射图, 见图 2.

衍射峰指标化后可得表 1. 该晶体属四方晶系, 空间群 I4₁/a. 在晶胞参数计算时, 注意到 D 值在高角度区具有较高分辨率这一事实, 根据四方晶系面间距公式可以得到 Na₅Ho(WO₄)₄ 晶体, 晶胞参数为 a=11.437 Å, c=11.336 Å, c/a=0.991, 与文献[10]所报道的结果基本一致.

表 1

Angle	D(spacing)	H K L
11.014	8.0264	1 0 1
19.073	4.6492	2 1 1
22.022	4.0330	2 2 0
24.684	3.6037	3 0 1
24.881	3.5756	1 0 3
27.147	3.2821	2 2 2
29.291	3.0465	3 2 1
29.355	3.0401	3 1 2
31.341	2.8517	4 0 0
31.657	2.8240	0 0 4
33.315	2.6872	4 1 1
33.465	2.6755	3 0 3
33.596	2.6654	1 1 4
35.154	2.5507	4 2 0
36.999	2.4276	3 3 2
38.702	2.3246	4 2 2
40.297	2.2362	5 0 1
40.297	2.2362	4 3 1
43.429	2.0819	5 2 1
43.788	2.0657	2 1 5
44.914	2.0165	4 4 0
46.504	1.9512	4 3 3
46.504	1.9512	5 0 3
47.858	1.8991	4 4 2
49.212	1.8500	6 1 1
49.252	1.8485	5 3 2
50.565	1.8036	6 2 0
51.918	1.7597	5 4 1

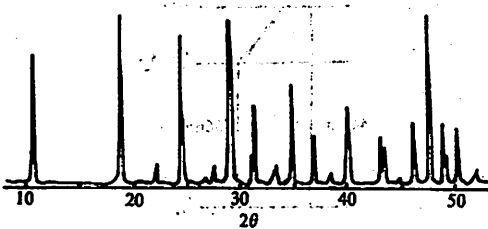


图 2 Na₅Ho(WO₄)₄ 晶体粉末 X 射线衍射图

3.2 红外光谱

将 $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体研细与 KBr 混合压片, 在 IR-440 型红外分光光度计上扫描 $5000\sim 300\text{cm}^{-1}$ 波段内室温下的红外吸收光谱, 见图 3.

这是典型的 WO_4^{2-} 离子团特征吸收谱. 主要有 $700\sim 960\text{cm}^{-1}$ 范围内的 WO_4^{2-} 离子团拉伸振动强吸收带和 380cm^{-1} 附近的 WO_4^{2-} 离子团弯曲振动吸收带, 这些吸收带均为 WO_4^{2-} 离子集团的特征吸收, 与稀土离子无关. 2900cm^{-1} 附近的吸收则是 KBr 中杂质吸收造成的.

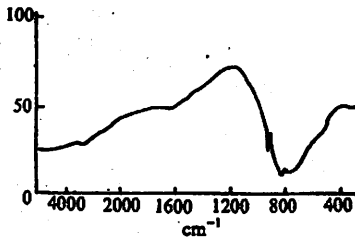


图 3 $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体的红外吸收光谱

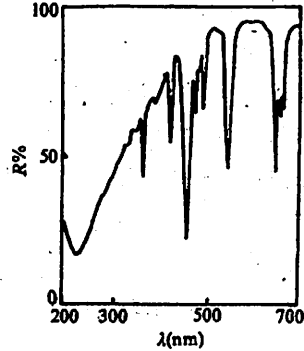


图 4 $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体的反射光谱

3.3 反射光谱

通过对晶体样品反射光谱的测定, 可以了解它的吸收特性. 实验是在日本 UV-240 紫外可见分光光度计上完成的, 测量范围为 $200\sim 700\text{nm}$ 波长, 见图 4.

可见, 此晶体的吸收谱比较丰富, 紫外区有强烈的基质吸收, 吸收边约在 290nm 处. 对于 Ho^{3+} 离子, $z=67$, 电子组态 $4f^{10}$, 由洪德规则可知, Ho^{3+} 的基态光谱项为 5I_8 . 位于 360nm 、 420nm 、 450nm 、 485nm 、 540nm 、 642nm 附近的吸收, 均为 Ho^{3+} 离子 $4f$ 电子受激吸收所特有, 它们分别对应于 3H_6 、 5G_5 、 5F_1 、 5F_3 、 5S_2 (5F_4) 和 5F_5 等谱项的跃迁, 其中以 $^5I_8\rightarrow^5F_1$ 的吸收跃迁 (450nm) 为最强.

3.4 荧光光谱

在日立公司 850 型紫外可见荧光分光光度计上测量了室温下不同激发波长时 $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体的荧光光谱, 图 5 的激发波长为 445nm , 测量范围为 $470\sim 870\text{nm}$.

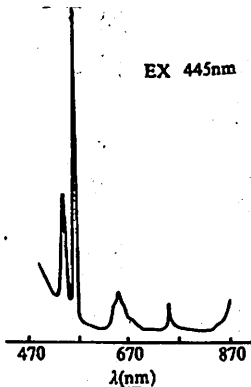


图 5 $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体的荧光光谱

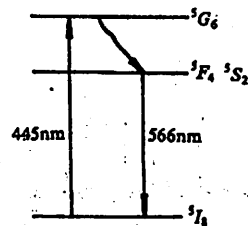


图 6 $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体黄绿光发射图

在可见光区域内,该晶体主要给出四条发射谱线,它们分别位于 546nm、566nm、660nm 以及 756nm 处. 当用 445nm 波长激发时, Ho³⁺ 离子会经过图 6 所示的发射过程, 产生 ⁵S₂—⁵I₈ 跃迁的强黄绿色荧光发射(546nm, 566nm).

其次, 660nm 和 756nm 的荧光发射则分别来自能级 ⁵F₃—⁵I₇ (⁵F₅—⁵I₈) 和 ⁵S₂—⁵I₇ 的跃迁. 表明该晶体有较强的荧光发射和优良的色纯度.

室温下, 一般很难观察到 Ho³⁺ 离子的 ⁵I₆—⁵I₈、⁵I₆—⁵I₇ 以及 ⁵I₇—⁵I₈ 的跃迁.

3.5 激发光谱

在同样的仪器上测量了荧光位置在 566nm, 激发波长变化范围为 320~570nm 的激发光谱, 如图 7 所示. 显然, 其中以 445.5nm 的激发效果为最佳, 它对应于 ⁵I₈—⁵G₆ (⁵F₁) 的吸收跃迁. 此外, 在 370nm、470nm、530nm 等处也存在一些较弱的激发峰, 表明用 445nm 波长激发时, 对于 Na₅Ho(WO₄)₄ 晶体的 566nm 荧光发射是极为有利的. 同时, 比较图 7 与图 4 可发现, 在 320~570nm 范围之内激发光谱与反射光谱诸峰位完全一致.

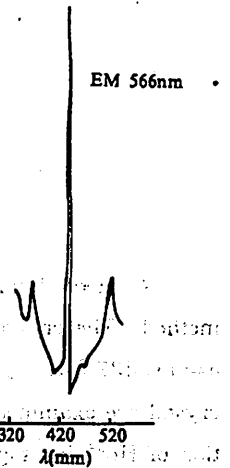


图 7 Na₅Ho(WO₄)₄ 晶体的激发光谱

4 小结

本文系统研究了室温下 Na₅Ho(WO₄)₄ 晶体中 Ho³⁺ 离子的反射光谱、激发光谱及荧光光谱. 结果表明, 用 445nm 波长激发时, 该晶体会产生 566nm (⁵S₂—⁵I₈) 的强黄绿色荧光发射, 是一种良好的化学计量比型 Ho³⁺ 发光材料. 计算了该晶体的晶胞参数. 关于 Ho³⁺ 离子的振子强度与唯象强度参数、电偶跃迁几率与辐射寿命等计算结果将另文发表.

参 考 文 献

- [1] Johnson L F et al., *Appl. Phys. Lett.*, 7(1965), No. 5, 127.
- [2] Johnson L F et al., *Appl. Phys. Lett.*, 8(1966), No. 8, 220.
- [3] Weber M J et al., *J. Chem. Phys.*, 57(1972), No. 1, 56.
- [4] Gandy H W et al., *Appl. Phys. Lett.*, 6(1965), No. 12, 237.
- [5] Caspers H H et al., *J. Chem. Phys.*, 53(1970), No. 8, 3208.
- [6] Kaminskii A A et al., *Phys. Status. Solid*, (a), 53(1979), No. 2, k219.
- [7] 姚连增, 中国激光, 16(1989), No. 2, 123.
- [8] 姚连增, 中国科技大学学报, 18(1988), No. 2, 245.
- [9] 姚连增, 中国激光, 18(1991), No. 10, 796.
- [10] Трунов В К и. т. д., *Ж. неоргани. химии*, 23(1978), 2645.

Study on Growth, Structure and Spectral Properties of $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ Single Crystal

Yao Lianzeng Cheng Tingzhu⁺ Ruan Yaozhong Zhang Yuheng⁺

(Dept. of Materials Science and Engineering)

(⁺Center of Structure and Element Analysis)

Abstract

A novel luminescent crystal of $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ is grown from stoichiometric melts by flux method. The crystal belongs to the tetragonal system, with space group $I4_1/a$, and cell parameters $a=11.437 \text{ \AA}$, $c=11.336 \text{ \AA}$, $c/a=0.991$. The excitation, reflection and fluorescence spectra of such crystal are examined at room temperature. The strong fluorescence emission of the $^5S_2-^5I_8$ transition of Ho^{3+} ion suggests that it will be a potential material.

Key words: luminescent crystal, spectral of crystal $\text{Na}_5\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$, rare earth, flux growth method

微波等离子体化学气相淀积 ZrO_2 薄膜的表面形貌研究*

曹传宝 喻维杰 孟广耀
彭定坤 李凡庆⁺

(材料科学与工程系)

(⁺结构成分分析中心)

摘 要

以锆的 β -二酮螯合物为源,以微波等离子体化学气相淀积方法合成 ZrO_2 薄膜过程中,观察到不同淀积条件下出现的四种不同表面形貌。从等离子体的电子温度、电子密度和源物质的浓度等方面对几种形貌的成因进行了讨论。同时用扫描电镜观察了高温退火及等离子体退火对薄膜形貌的影响,以及不同衬底薄膜形貌的差异。

关键词: ZrO_2 薄膜, 表面形貌, 等离子体化学气相淀积

中图分类号: O484.1

1 引言

ZrO_2 作为一种优良的固体电解质材料受到人们的广泛重视^[1]。立方稳定的 ZrO_2 具有很好的氧离子导电性,它在氧传感器、氧泵、燃料电池等方面具有极为广泛的应用。

薄膜材料相对于体材料来说有更多的优点,它用在传感器上有灵敏度高、响应时间短的优点;用在燃料电池上,随着薄膜厚度的减小,材料的体电阻大大减小,电池的效率可以大大提高。因而 ZrO_2 作为薄膜材料之一,其制备及性能的研究受到广泛重视^[2,3]。

薄膜的性能同薄膜的微结构直接相关,本文讨论微波等离子体条件下,薄膜制备的工艺条件及等离子体微观参量同薄膜的表面形貌之间的关系。

1991年4月29日收到。

* 国家自然科学基金资助项目

2 实验

微波等离子体装置如图 1 所示,包括微波发生器,工作频率为 2450MHz,波导管,功率计,外径 40mm、内径 35mm 的石英反应管,反应管上设置源加热炉及淀积区加热炉,温度控制器分别由 Eurotherm 和 JWK-702 型温度控制仪控制,气体流量由质量流量计调节。

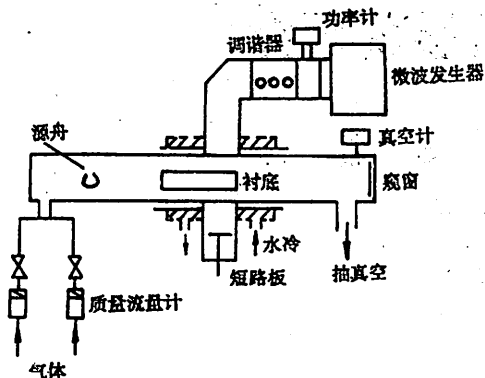
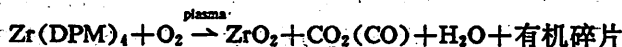


图 1 微波等离子体设备示意图

操作步骤 源物质称量后装在小孔挥发瓶中,小孔孔径为 2mm,挥发瓶置于源加热炉区,距等离子体中心约 16-18cm,衬底经超声清洗后放在石英托架上推入淀积区,通入载气及反应气后抽真空,加热源物质,开微波电源加等离子体,淀积一定时间后,先关源加热炉,再关等离子体,关泵,切断反应气及载气,开炉取出样品后,对样品进行测试。

典型淀积条件 等离子体功率为 200W,反应气和载气为 $O_2 + Ar$,其流量 Ar 为 216sccm, O_2 为 75sccm,系统压力为 400~500Pa,源物质用 $Zr(DPM)$,金属有机化合物, [$DPM = (CH_3)_3COCH_2COC(CH_3)_3$]源温控制在 170℃,衬底用玻璃,宝石 ($\alpha-Al_2O_3$),陶瓷 ($\alpha-Al_2O_3$) 及硅片,淀积时间一般为 1 小时,淀积反应一般为:



薄膜的检测 用 D/max-ra 型 X 射线衍射仪鉴定薄膜的物相,X-650 型扫描电子显微镜观察薄膜的形貌,ESCALAEMK I 型电子能谱仪测量薄膜的成份。

3 实验结果

利用微波等离子体设备成功地在低温下制备出了 ZrO_2 薄膜,并对其性质进行测定,其结果另文发表。本文主要讨论不同条件对淀积膜表面形貌的影响。

3.1 不同条件下薄膜的表面形貌

卧式反应器中,不同位置的微观条件有较大变化。可以将它们的变化分成四个区域,如图 2 所示, I 区域位于上气流一端,距等离子体中心约 6-10cm,该区域中等离子体能量最低,电子能量及电子密度较小; I 区域位于上气流,距等离子体中心约 3~5cm,该区域等离子体能量较高,电子能量略低于等离子体中心,但根据测量,电子密度甚至比等离子体中心还高^[4]; II 区位于等离子体中心,等离子体能量最高;区域 IV 位于下气流等离子体能量下降得很快。

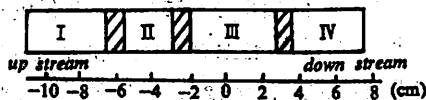


图 2 淀积区中四种典型形貌形成区域示意图(阴影部分为重叠区域)

当改变衬底在反应管中的位置时,一般可得到四种典型形貌的薄膜,其形成区域对应于图 2. 改变实验条件,四种形貌的形成区域向前或向后略有移动. 四种典型形貌的扫描电镜照片如图 3 所示,其对应的 XRD 图则由图 4 所示.

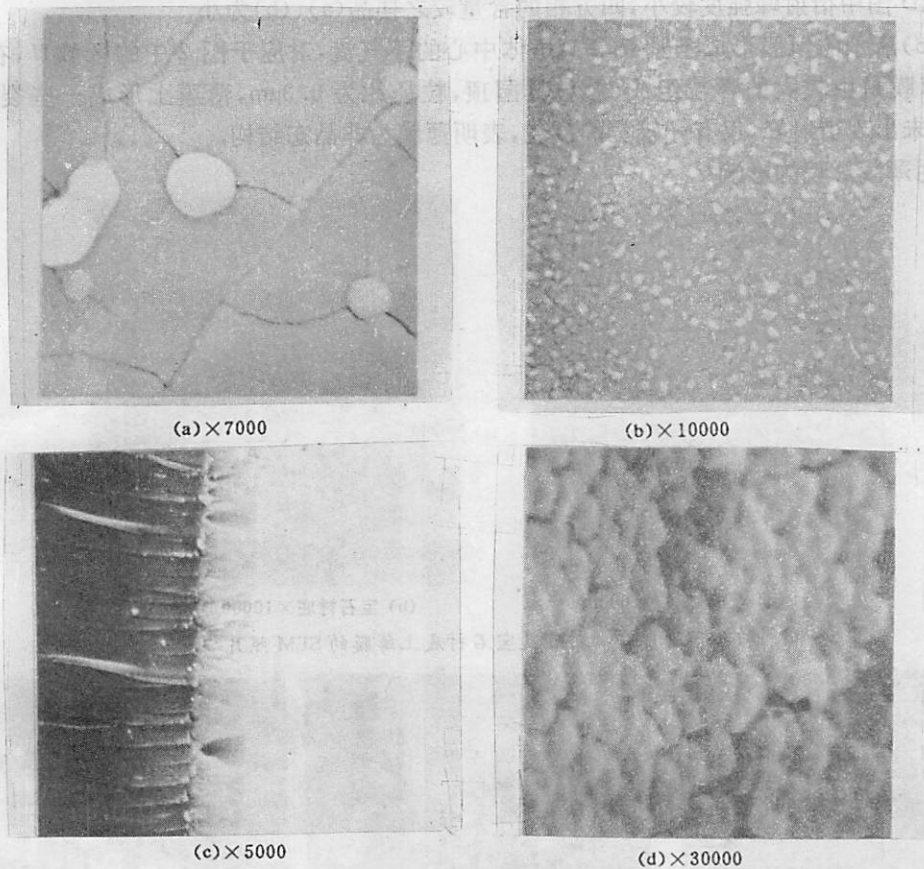


图 3 四种典型形貌的 ZrO_2 薄膜 SEM 照片

(a)、(b)、(c)、(d)分别是在图 2 中区域 I、II、III、IV 生成的薄膜

图 3(a)所示的薄膜是在图 2 中 I 区域内形成的,从图中可以看到,薄膜的形貌是平整的块状,在放大到一万倍的情况下仍然看不见薄膜中的晶粒,证明形成薄膜的颗粒很细. 在该薄膜上形成一些裂纹,且在裂纹的分叉处嵌有一些粒径为 $1.5 \sim 0.5 \mu m$ 的白色颗粒. 图 4(a)为该薄膜的 XRD 图,衍射峰较宽,主要为四方相结构.

图 3(b)所示的薄膜形成于图 2 中的区域 II,从照片可以清楚地看到薄膜中含有两种不同颜色的晶粒,粒径约为 $0.1 \sim 0.2 \mu m$,薄膜是致密的. 从对应的 XRD 图看,薄膜中含有两种相,分别为单斜相和四方相,从 XRD 图中单斜相和四方相的峰面积比,可以粗略估算样品中单斜相和四方

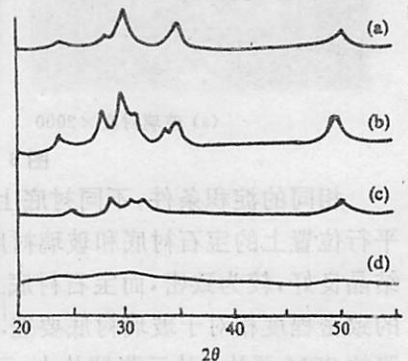


图 4 四种典型形貌的 X 射线衍射图(对应于图 3)

相的含量比为 3 : 4.

图 3(c)所示的薄膜在等离子体中心附近形成,对应于图 2 中的区域 III,薄膜的表面较为粗糙,还含有一些气孔,孔径约为 $1.8 \sim 0.6 \mu\text{m}$,从薄膜的截面可以看出,薄膜是纵向生长的.对应的 XRD 图中衍射峰强度较小,四方相的含量较之样品(a)、(b)为小.

图 3(d)所示的薄膜形成于紧靠等离子体中心的下气流,对应于图 2 中的区域 IV,在形貌照片中,薄膜是由较大的颗粒组成,颗粒具园顶,粒径约为 $0.3 \mu\text{m}$,薄膜上形成一些裂纹,其 XRD 图中未出现衍射峰,仅有一较宽的鼓包,表明薄膜为非晶态结构.

3.2 衬底对薄膜形貌的影响

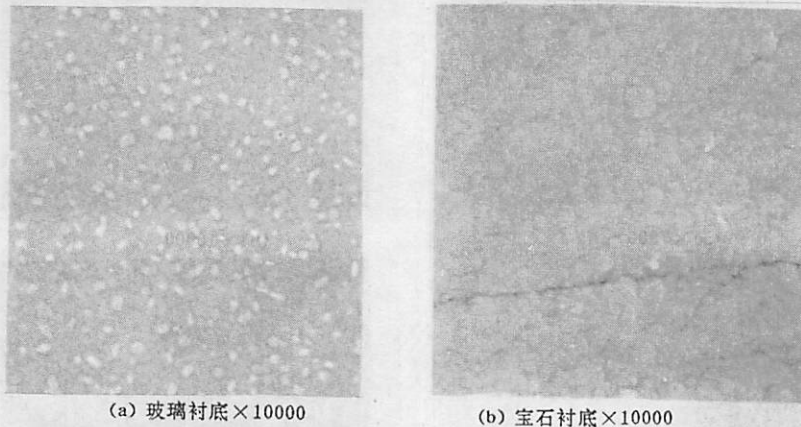


图 5 相同的淀积条件玻璃衬底及宝石衬底上薄膜的 SEM 照片

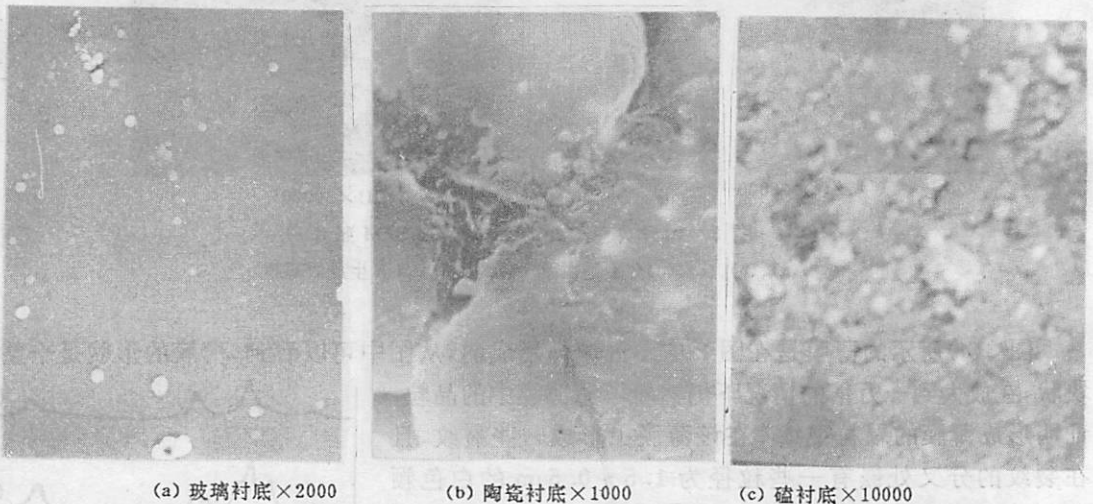


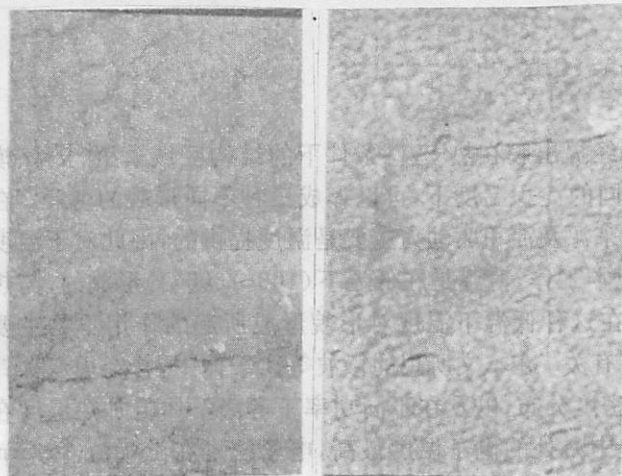
图 6 不同衬底上 ZrO_2 薄膜的 SEM 照片

相同的淀积条件,不同衬底上淀积的薄膜,其形貌是有很大的差别的,图 5 是同一次淀积中平行位置上的宝石衬底和玻璃衬底上的 ZrO_2 薄膜的 SEM 照片.可以看出,玻璃衬底上的薄膜结晶良好,较为致密,而宝石衬底上的颗粒晶形不明显,表面粗糙度大,甚至有裂纹出现,薄膜的致密程度相对于玻璃衬底要差.图 6 为同一次淀积中,同样区域三种衬底上形成的 ZrO_2 薄膜的 SEM 照片.从三张照片上,可以看到,玻璃衬底上形成的是细小颗粒的平整薄膜;单晶硅衬底上形成的薄膜含有很多的孔隙,薄膜疏松;而在陶瓷衬底上,由于衬底本身具有多孔结构,

颗粒间的孔隙未被填满,在衬底颗粒的表面生长的薄膜不平整。

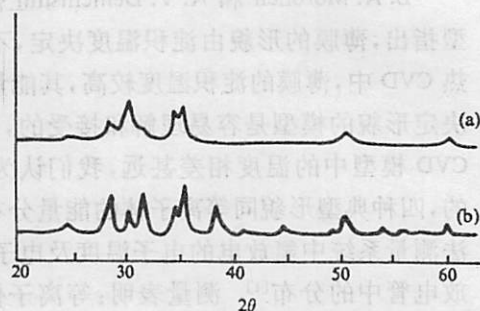
3.3 退火前后薄膜形貌的变化

将淀积后的薄膜在 900°C 下空气气氛中退火一小时,缓慢冷却后作 XRD 曲线及 SEM 照片,图 7 和图 8 分别为样品退火前后的 SEM 照片及 XRD 图。从照片可见退火后薄膜的颗粒变得清晰了,表明薄膜得到进一步的晶化,原先薄膜上的裂纹变得更为明显。从 XRD 图上可以看到退火后衍射峰明显增多,峰形变尖锐,也说明退火使薄膜得到进一步晶化。还可看到单斜相的峰强增加较之四方相更为明显,表明退火可以使亚稳态的四方相向单斜相转化。



(a) 退火前 $\times 10000$ (b) 退火后 $\times 9900$

图 7 退火前后宝石衬底上 ZrO_2 薄膜的 SEM 照片

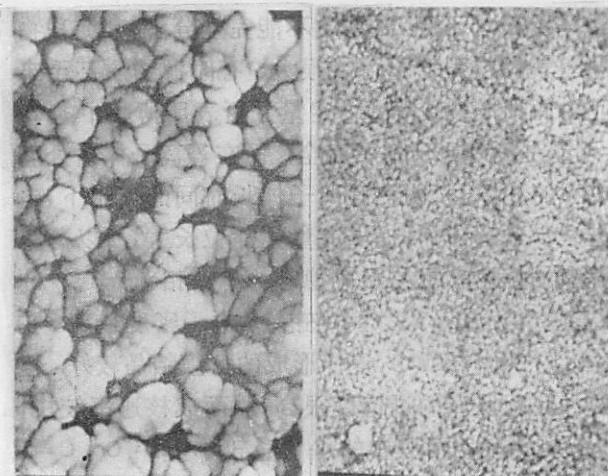


(a) 退火前 (b) 退火后

图 8 退火前后的 X 射线衍射图

3.4 等离子体退火薄膜的形貌

等离子体淀积薄膜后,继续让薄膜处于等离子体的轰击之下,一定的时间后,所形成薄膜



(a) $\times 1000$ (b) $\times 5000$

图 9 等离子体后处理后薄膜的 SEM 照片

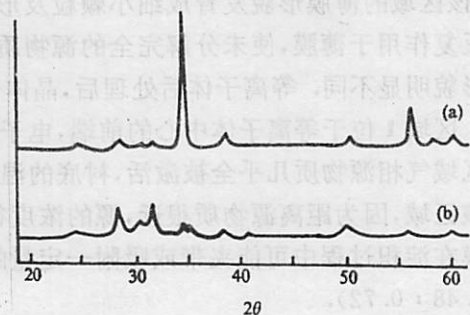


图 10 等离子体后处理薄膜的 XRD 图

源温: 180°C Ar: 144scm , O_2 : 72scm 真空度: 400Pa

等离子体功率: 200W 淀积时间: 1 小时

后处理时间: 3 小时 衬底: 宝石

的形貌不同于未轰击的薄膜。图 9 中的 SEM 照片所示的薄膜是在淀积 1 小时后,继续在等离子体中轰击 3 小时后形成的。图 9(a)所示薄膜是在等离子体中心区域形成的,从照片可以看出,薄膜由较大的颗粒组成,粒径约 $1\mu\text{m}$ 左右,但颗粒之间排列不紧密,薄膜中含有较多的空隙。图 9(b)所示的薄膜是在距等离子体中心较远的上气流区域淀积的,对应于图 2 中的区域 I,但从薄膜的表面形貌上看出,与图 3(a)形貌显著不同,经过等离子体退火处理,发现薄膜由均匀的小颗粒组成,粒径约为 $0.1\mu\text{m}$ 左右,颗粒之间同样存在着小孔隙。图 10 所示的是对应的 XRD 图,其衍射峰比较尖锐,而且主要由单斜相组成,仅含有少量的四方相。

4 结果讨论

B. A. Morohen 和 A. V. Demchishin 曾经提出膜在热 CVD 条件下的结构区域模型^[5]。该模型指出,薄膜的形貌由淀积温度决定,不同的淀积温度下,可以形成三种不同形貌的薄膜。在热 CVD 中,薄膜的淀积温度较高,其能量来源及淀积驱动力主要是温度提供的,因此对于温度决定形貌的模型是容易理解和接受的,但本工作,薄膜是在低温下($100\sim 300^\circ\text{C}$)形成的,与热 CVD 模型中的温度相差甚远,我们认为在这种低温下温度对形貌形成所起的作用不是主要的,四种典型形貌同等离子体的能量分布有关。在本文所用的微波等离子体中,曾经用双探针法测量系统中氩放电的电子温度及电子密度分布,以及在不同功率下等离子体自加热温度在放电管中的分布^[4]。测量表明,等离子体中心处的电子温度最高,电子密度在上气流 $3\sim 5\text{cm}$ 处比等离子体中心更高。

在区域 I 所形成的薄膜距等离子体中心最远($d>6\text{cm}$),该区域的电子温度及电子密度均较低。我们测量过源物质 $\text{Zr}(\text{DPM})_4$ 的质谱,用 EI 源进样,用 70eV 的标准能量轰击样品,结果发现其质谱碎片中含有很多的 $\text{Zr}(\text{DPM})_4$ 等大分子碎片,证明 $\text{Zr}(\text{DPM})_4$ 在电子的轰击下不是一步分解完全的。在区域 I 中电子温度和电子能量均不高,源物质不能完全分解,其淀积物上含有有机基团。这种条件下生长出来的薄膜,其晶粒发育不可能很大。有时源物质甚至未分解凝聚到衬底上的颗粒,使得薄膜内产生应力而形成裂纹。XPS 定量分析表明薄膜中的 $\text{Zr}:\text{O}:\text{C}=1:2.88:1.85$ 。证明有较多的碳,可能是源物质分解不完全。而在等离子体后处理后,该区域的薄膜形貌发育成细小颗粒及形成小的孔隙,表明在等离子体长时间的作用下,电子反复作用于薄膜,使未分解完全的源物质进一步分解,同时提供能量使晶粒长大,所以薄膜的形貌明显不同。等离子体后处理后,晶体长大的过程中,更易形成稳态的单斜相。

区域 II 位于等离子体中心的前端,电子温度较高(约 $7.5\times 10^4\text{K}$ 左右),电子密度最高。在该区域气相源物质几乎全被激活,衬底的温度达约 $200\sim 300^\circ\text{C}$,这样形成的薄膜结晶较好。但在该区域,因为距离源物质很近,源的浓度很大,淀积反应的过饱和度很高,因而成核速率较快,薄膜在淀积过程中可能夹带或吸附一定量的 C,测量表明薄膜中的 C 含量较小($\text{Zr}:\text{O}:\text{C}=1:2.48:0.72$)。

区域 III 位于等离子体中心,电子能量最高,电子密度也较高。在该区域,不但金属与配体的配位键被打断,甚至有机配体本身的 C-H 键都能打断,从而生成 CO 和 CO_2 气体。在淀积过程中,这些气体成分吸附在格位上,占据了一定的空间,因此 ZrO_2 薄膜只能柱状向上生长,同时薄膜上出现一些气孔。

区域Ⅳ位于等离子体的后端,由于源物质的耗尽效应,该区域中的源物质浓度较低,淀积反应的过饱和度很小,成核速率较小,同时衬底温度较低(低于 $200^{\circ}C$)。离子在衬底表面的迁移趋势很小,所以形成向上长大的园顶形。由于电子温度和电子密度在下气流一端下降得很快,该区域的电子温度及电子密度均较小,源物质分解不完全,因而未形成结晶状态。

从XRD图上,可以看到薄膜中含有一定量的亚稳态的四方相。这同薄膜形成于非平衡状态下的等离子体中有关,在等离子体合成中经常可以形成亚稳态的化合物,如等离子体中金刚石的合成就是一例。

退火之后,薄膜进一步晶化,同时单斜相的含量增多,这是因为经过热处理之后,晶体结构从亚稳相向稳定相转化。

等离子体退火处理同热处理相比,同样能使结晶完全,颗粒长大,且能促进四方相向单斜相的转变。图9(a)、(b)由于衬底所处区域不同,结晶状态不同,处理后晶粒的大小显著不同。但经过热处理后的薄膜中都含有较多的空隙,则是由于等离子体作用使原先薄膜中未分介的有机基团分介或吸附气体脱附造成的。

5 结论

等离子体中的微观状态影响薄膜形成的形貌。本文讨论了四种典型形貌生成。它们同等离子体的电子温度、电子密度及源物质的浓度密切相关。退火及等离子体后处理均能使晶体的颗粒进一步长大,还可以使亚稳相向稳定相转化。几种衬底比较,玻璃衬底上形成的 ZrO_2 薄膜较为致密。

参 考 文 献

- [1] Moghadam K F, Stevenson D A, *J. American Ceramic Society*, 65(1982), No. 4, 214.
- [2] Harao Uyama, Nobuhiro Oka, Iso Ono and Osama Matsumoto, *Denki Kagaku*, 58(1990), No. 6, 564.
- [3] Pawlewica W T, Hays D D, *Thin Solid Films*, 94(1982), 31.
- [4] 王春林,中国科学技术大学材料科学与工程系硕士论文,1988年,
- [5] Movchan B A, Demchishin A V, *Fiz. Metal. Metalloved.*, 28(1969), No. 4, 653.

Research on Surface Morphology of ZrO_2 Thin Films Deposited by Microwave Plasma Assisted CVD Process

Cao Chuanbao Yu Weijie

Meng Guangyao Peng Dingkun

(*Department of Materials Science and Engineering*)

Li Fanqing

(*Structure Research Laboratory*)

Abstract

In the ZrO_2 thin films deposition process completed by microwave plasma CVD method, beta diketone chelates as volatile precursors, we find that in different deposition conditions, the thin film surface appears different in morphology. They can be divided into four kinds according to SEM observation. The relationship between morphology and plasma parameters such as electronic temperature, electronic density and source materials concentration is discussed. The effect of high temperature annealing and plasma post-treatment on surface morphology is also studied.

Key words: ZrO_2 thin films, surface morphology, microwave plasma assisted CVD

具有多级缓冲的快速光子计数器

彭虎 周佩玲 姚焜 郭光灿

(电子技术基础部)

(物理系)

摘 要

数字光子相关仪主要由光电计数电路和数据处理电路组成。光电计数电路作为系统的数据采集部分其性能直接影响处理结果,采用带有多级缓冲区的快速进位光子计数器,可准确动态地采集光电子脉冲数并由单片机进行处理。

关键词:光子相关仪,光子脉冲,多级缓冲,动态计数器

中图法分类号:TP274.2

1 引言

在激光光子相关技术中,需要记录光电倍增管的输出光脉冲信号。一般入射光越强,光脉冲频率越高。在相关处理中,要求计数电路在整个数据采集期间始终处于计数状态,不能停止,计算机要从正在计数的计数器中获取正确数据。由于光脉冲的脉宽仅有50ns,要求计数电路必须有较高的计数频率。基于这些要求,为光子相关仪设计一种新型高速可靠的计数电路是完全必要的^[1]。

2 电路原理

光电计数电路如图1所示,进入16位计数器的脉冲信号是由光电倍增管输出经放大甄别后的光脉冲,当设定的定时时间到,计数器的内容打入缓冲区,随后被8031单片机控制送入存储器暂存,缓冲区选择电路确保输入到存储器的内容是计数器在动态计数状态中的稳定输出而不是计数器在翻转时的不确定内容。

2.1 快速计数电路

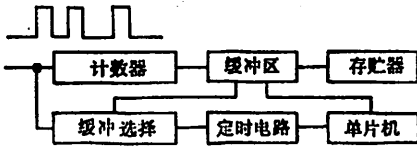


图 1 光电计数电路原理图

图 2 是 16 位的快速计数电路，它由四片 74LS161 芯片按片间快速进位连接而成，74LS161 芯片是 4 位二进制同步计数器，上升沿有效，可直接清除，数据可并行预置，具有进位输出信号，可串接计数使用，该芯片在 $S_1=S_2=“1”$ 的条件下允许计数。从图 2 电路连接可知：第一片 74LS161 一直处于计数状态，只要光脉冲到来就开始计数，当计满 15 个脉冲时 $Q_{\infty} = “1”$ ，该 Q_{∞} 信号有两个作用：其一使后面各芯片的 $S_1 = “1”$ ，其次使第二片的 $S_2 = “1”$ ，从而第二片

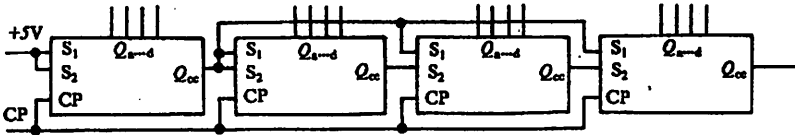


图 2 快速计数电路连接图

74LS161 可以开始计数。当第一片计数到 1111 状态，下一个脉冲会使第一片和第二片同时翻转为 0000 和 0001 状态，同理，当前面三片状态均为 1111 时，下一个脉冲会使四片同时翻转。可见，这种联接方式的最高计数频率与计数器的位数无关。

2.2 缓冲区选择电路

由于数据的获取是在计数器动态计数过程中进行的，因此会有下面三种可能的情况发生：

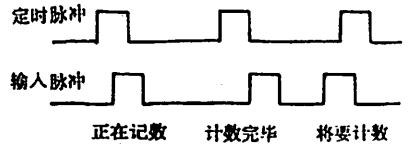


图 3 动态数据三种情况示意图

- 1) 定时脉动到来时，计数器正好处于翻转状态，这时的数据是不稳定的。
- 2) 计数器处于等待下一个定时脉冲到来的状态，这种情况下，数据可用。

- 3) 计数器输出稳定，但在将其数存入存储器时，正好输入脉冲使计数器翻转，因而数据不稳定。

上述三种情况可用图 3 描述。

为了确保采集的数据是稳定有效的，就要设法使计数器工作在第二种情况，为此设计了一个缓冲区选择电路，其电路原理如图 4。

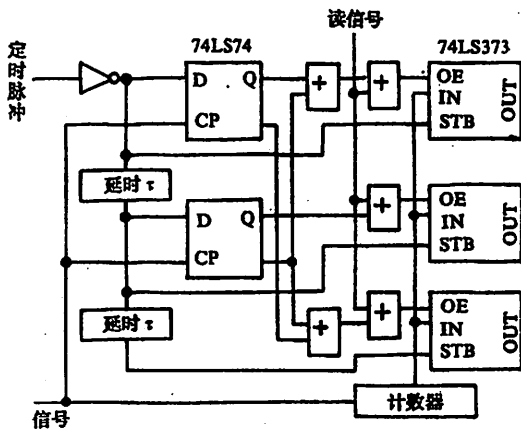


图 4 缓冲区选择电路图

采用锁存器 74LS374 组成三组缓冲区，锁存器的输入控制端 \overline{STB} 和输出控制端 \overline{OE} 由 D 触发器和逻辑电路控制。定时脉冲信号分成 A、B、C 三路，B、C 两路分别比 A 路延时 τ 和 2τ 时间，可以这样认为，当定时时间到，打入缓冲区的内容分别是该时刻，该时刻后的 τ 时刻以及

2τ 时刻的计数器内容,适当地选择 τ 可以保证这三组缓冲区的内容总有一个是稳定有效的.通过电路分析,卡诺图化简,设计了逻辑控制电路以确保每次存入存储器的内容是从具有稳定有效数据的缓冲区获得的.

3 实验结果

为了验证该电路设计的准确性,用此电路对 20 兆赫信号发生器的输出进行了测量,得到令人满意的结果.现将此计数电路用在光子相关仪中^[1],对周期性变化的光场进行了测量.

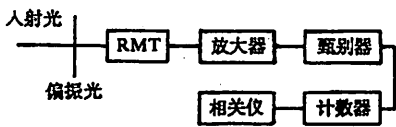


图5 实验装置图

图5是实验装置图,对带噪声的日光灯信号进行测量.通过对所测数据进行相关处理,即可把深埋在噪声中的周期信号提取出来^[2,3].

日光灯所通过的电流是正弦交流电,其电压幅度变化频率为 100Hz,因此,日光灯光强是周期为 0.01 秒的周期函数,日光灯的相关时间很短,约为 $10^{-9} \sim 10^{-8}$ 秒,在 10^{-6} 秒左右的取样时间中测得的实际计数值反映的是平均光强的变化^[2]. 干扰信号一般来讲是不相关的,故在相关计算中,周期信号加上噪声信号仍然是原周期信号的自相关函数^[4,6]. 图6为测得的受到日光干扰的日光灯曲线,图7为通过相关计算得出的相关曲线.从图中可以明显地观察到尽管原始信号受到很大干扰,但相关处理后的曲线却相当好地反映出周期信号的存在.

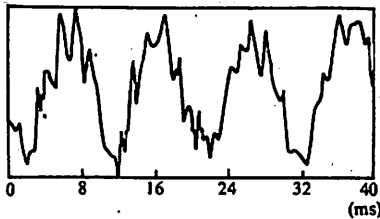


图6 带噪声的日光灯曲线

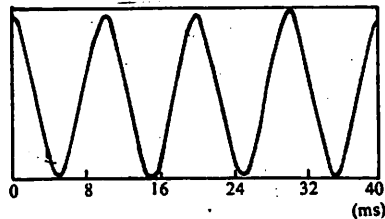


图7 相关处理后的曲线

参 考 文 献

- [1] 周佩玲等,一种新型的光子相关仪的设计,中国科技大学学报,21(1991),No. 3,101-107.
- [2] 威廉男,泰克诚,程路,统计光学导论,南开大学出版社,天津,1987,38-74.
- [3] 徐秉征,欧阳景正,信号分析与相关技术,科学出版社,北京,1981,10-48.
- [4] J.S. 贝达特, A.G. 皮尔[美],凌福根译,随机数据分析方法,国防工业出版社,1980,85-107.
- [5] 浙江大学数学系,概率论与数理统计,高等教育出版社,1987,102-193.
- [6] 何振亚,数字信号处理的理论与应用,人民邮电出版社,1987,47-108.

A Fast Photo-Counter With Multi-level Buffers

Peng Hu Zhou Peiling

(Department of Electronic Engineering)

Yao Kun Guo Guangcan

(Department of Physics)

Abstract

Digital Photon Correlator (DPC) is composed of a Photo-counter and a data processing unit. The performance of Photo-counter in data acquisition system has a direct influence on data processing. The Photo-counter with fast carry designed here has multi-level buffers. Photon pulses can be correctly and dynamically recorded by the Photo-counter and processed by a single chip computer.

Key words: photon correlator, photon pulses, multi-level beffer, dynamic counter.

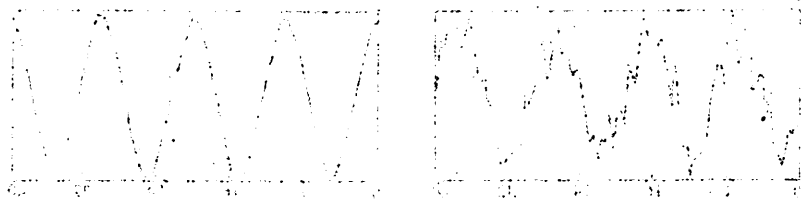


Figure 1: Waveform of regular pulses

Figure 2: Waveform of irregular pulses

光子相关器 (DPC) 由光子计数器和数据处理单元组成。光子计数器在数据采集系统中的性能对数据处理有直接影响。这里设计的具有快速进位的具有多级缓冲器的光子计数器能正确、动态地记录光子脉冲并由单片计算机处理。

关键词: 光子相关器, 光子脉冲, 多级缓冲器, 动态计数器。

格雷码色标微机检测系统

吴耿锋 万炳奎 顾雨民 郭明明

(中国科技大学)

贺关华

(安徽新华印刷厂)

摘 要

介绍了一种基于单板微型计算机的格雷码色标检测方法。该方法用于对规格化的书帖毛本的出错检测获得成功。文中对该系统的脉冲红外光电探测部分和单板微机的智能检测部分作了较为详细的介绍。

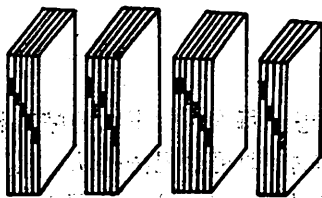
关键词：脉冲红外发光二极管，红外光敏管，格雷码，数字滤波

中图法分类号：TP274

1. 前言

色标检测可用于多种场合，如印刷厂书本装订过程中书帖毛本的色标检测。为了防止书

本装订过程中的漏帖、重帖和倒帖等错误，传统的检测方法是利用书帖毛本一侧的色标进行人工目视检测。图1(A)为正常的阶梯色标。若发现阶梯色标变形便人工检出。图1(B)为倒帖的情况，即中间有两帖倒位。图1(C)和(D)分别为重帖和漏帖的情况。



(A)正常 (B)倒帖 (C)重帖 (D)漏帖

图1 书帖毛本可能出现的几种情况

很明显，采用人工目视检测法，检测人员眼睛极易疲劳，准确率不高。我们研制的格雷码色标微机检测系统旨在取代人工目视检测，提高检测的准确率。试验表明，该系统对规格化的格雷码书帖毛本的检测准确率可达100%

2 系统基本工作原理

格雷码^[1]色标微机检测系统的原理框图如图 2 所示. 它由脉冲红外光电探测部分和单板微机检测部分组成. 其工作原理如下:

光电色标探头将按格雷码编码的不同色标转换成不同数量的脉冲. 微机作为智能部件, 首先对标准书帖毛本进行样本学习, 形成标准表, 然后将被检书帖的格雷码及其相应的脉冲计数经数字滤波后同标准表比较, 从中检出对应漏帖、倒帖和重帖的错码, 接着进行报警并动作机械装置, 检出出错的毛本.

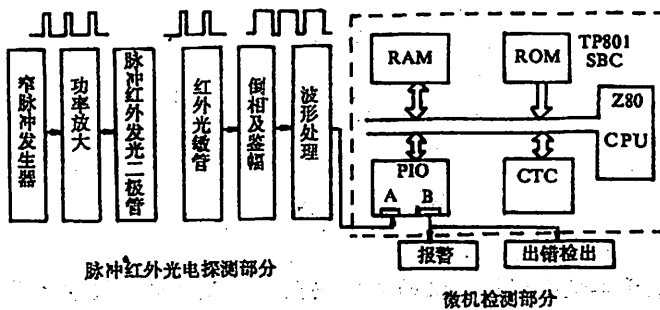


图 2 格雷码色标微机检测系统框图

3 脉冲红外光电探测部分

设计高灵敏度的色标探头是该检测系统的关键^[2,3]. 我们设计的光电色标探头由 2GL-2DU 对管组成. 脉冲红外发光二极管 2GL 发射一定频率的红外脉冲, 经色标反射后被红外光敏管 2DU 接收. 实验证明, 脉冲红外发光二极管有比用直流驱动的发光二极管高得多的灵敏度. 由 5G1555 时基电路产生的 2KHz 的高占空比的窄脉冲作为 2GL 的驱动脉冲, 这对降低 2GL 的管耗、延长 2GL 的工作寿命是非常重要的. 反射脉冲经单稳电路, 生成有一定脉宽的脉冲作为计算机的中断信号和计数脉冲, 脉冲波形见图 2.

4 微机智能检测部分

单板微机作为智能检测部件首先体现在它的学习功能. 考虑到每次被检书帖的帖数和厚薄不同, 在检测一种新的毛本之前, 必须让计算机对若干标准样本(即用目视法确认无误的毛本)进行学习, 形成标准对照表. 为了说明学习的原理, 以一个有十帖的毛本为例. 图 3 为具有四位格雷码色标书帖实验示意图. 书帖上的色标按格雷码编制(黑色标对应 0, 白色标对应 1). 一个探头窗口对应一位格雷码. 入射脉冲和反射脉冲经由同一窗口, 探头面板紧贴色标. 检测时, 书帖作上下垂直运动, 这样, 计算机可读得对应每一帖书的格雷码 0001, 0011, 0010 …… 因为光电色标探头发射的是一串窄脉冲, 对应格雷码中为 1 的窗口可计得一定数量的脉冲, 它的多少取决于书帖的运动速度以及厚薄. 书帖毛本的运动速度基本上是一样的(自由落

体),因而脉冲计数直接与书帖的厚度成比例。样本学习程序对十本标准毛本检测,并将各次计得的相应的脉冲个数进行平均,形成如表 1 所示的标准格雷码 G_i 与标准脉冲计数 N_i 的对照表。

引入滤波功能是该系统智能检测的另一个特点^[4]。表 2 列出了对一本书帖毛本实测的格雷码和相应的脉冲计数。分析该表可以发现,在正常的格雷码的排列中,插入了一些所谓干扰码。例如在 $G_4(0110)$ 后应接格雷码 (0111) ,而实际上却夹入了 $G_5(1110)$ 、 $G_6(0110)$ 。产生这些码的原因是由于书帖运动不平稳以及帖与帖之间结合不紧密造成的。由于对应这些干扰码的脉冲计数很少,所以用数字滤波的方法很容易去掉。这样就形成了经数字滤波的正式被检表(表 3)。显而易见,在形成标准表时也同样经过类似的数字滤波。

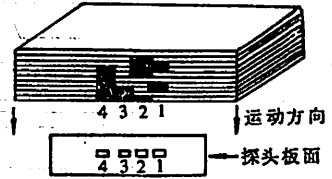


图 3 格雷码色标书帖实检示意图

表 1 G_i-N_i 标准表

G_i	格雷码	N_i	脉冲数
S_{s1}	0001	N_{s1}	43H
G_{s2}	0011	N_{s2}	3EH
G_{s3}	0010	N_{s3}	45H
G_{s4}	0110	N_{s4}	34H
G_{s5}	0111	N_{s5}	30H
G_{s6}	0101	N_{s6}	26H
G_{s7}	0100	N_{s7}	3BH
G_{s8}	1100	N_{s8}	30H
G_{s9}	1101	N_{s9}	2EH
G_{s10}	1111	N_{s10}	34H

表 2 实测被检表

G	格雷码	N	脉冲数
G_1	0001	N_1	40H
G_2	0011	N_2	3FH
G_3	0010	N_3	42H
G_4	0110	N_4	37H
G_5	1110	N_5	08H
G_6	0110	N_6	06H
G_7	0111	N_7	32H
G_8	0101	N_8	2AH
G_9	0100	N_9	40H
G_{10}	1100	N_{10}	35H
G_{11}	1101	N_{11}	30H
G_{12}	1111	N_{12}	31H
G_{13}	1110	N_{13}	04H

表 3 正式被检表

G	格雷码	N	脉冲数
G_1	0001	N_1	40H
G_2	0011	N_2	3FH
G_3	0010	N_3	42H
G_4	0110	N_4	37H
G_5	0111	N_5	32H
G_6	0101	N_6	2AH
G_7	0111	N_7	40H
G_8	1100	N_8	35H
G_9	1101	N_9	30H
G_{10}	1111	N_{10}	31H

图 4 为计算机检测的主程序及中断服务程序流程图。中断服务程序主要完成对格雷码的实时记录及相应的脉冲计数,形成实测被检表。中断信号由光电色标探头的输出脉冲的上升沿经 PIO 向 CPU 提出申请^[5]。在脉冲高电平期间,CPU 执行中断服务程序。主程序中包括样本学习、对中断服务程序形成的实测被检表进行数字滤波形成正式被检表以及对正式被检表与标准表的比较最后作出出错处理等。

计算机对错帖的判断有如下准则:若被检表的格雷码与标准表的格雷码不能一一对应,即对应的脉冲计数差值大於某一范围,则认为出现漏帖或倒帖。在重帖情况下,由于对应重帖的脉冲计数比单帖的脉冲计数大约多一倍,因而取当 $N > \frac{3}{2}N_s$ 时判断为出现重帖。

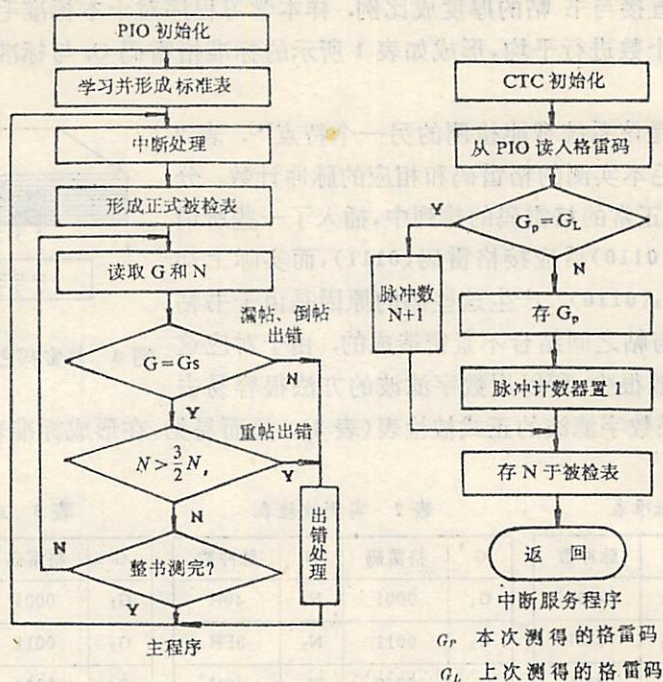


图 4 计算机检测程序流程图

格雷码具有相邻两个码仅有一个比特的状态是变化的特点。试验表明,采用一般二进制编码,对十帖装的毛本可检测到几十种状态(含重复的状态),这种情况随二进制位数的增加而变得更加严重。采用格雷码编码,对同样书帖装的毛本检测仅得 12—13 种不同状态,多出的 2—3 种状态因其对应的脉冲计数大大少于其它十个状态对应的脉冲数而极易剔除。

参 考 文 献

- [1] Kostopoulos K G, Digital Engineering, John Wiley & Sons Inc., 1975:206~210.
- [2] Roberts K S, Industrial Design with Microcomputers, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1982:100-119.
- [3] Coffron W J, Practical Interfacing Techniques for Microprocessor Systems, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1983:203-209.
- [4] 刘植桢等,计算机控制,清华大学出版社,1981:172-180.
- [5] 周明德,微型计算机硬件软件及其应用,清华大学出版社,1988:254-268.

Microcomputer-Based Detecting System for Gray Coded Mark Recognition

Wu Gengfeng Wan Bingkui Gu Yuming Guo Mingming

(Electronic Engineering Department)

He Guanhua

(Xia-Hua Printing Factory)

Abstract

A single board microcomputer-based detecting system for Gray coded mark recognition is introduced. The satisfactory results are obtained in semifinished book detecting in the printing factory. The optoelectronic detecting technique with infrared pulses and microcomputer-based intelligent technique are described in more detail.

Key words: light-emitting diode with infrared pulse, infrared photodiode, Gray code, digital filter

中国科学技术大学学报编委会

主 编：汪克林(代)

副 主 编：(按姓氏笔划排序)

冯克勤 伍小平 刘耀阳

汪克林 张懋森 钱景仁

杨延龄

责任编辑：袁克林 杨延龄

英文编辑：崔海建

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1期(总第76期)1992年3月出版

Journal of China University of

Science and Technology

(Quarterly, Started in 1965)

Vol. 22 No. 1 (Sum. 76) Mar. 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 Corporation
(P. O. Box 399 Beijing, China)

国内统一刊号：CN34—1054

邮政代号：26—31

国外代号：Q527

定价：3.80元