

ISSN 0253-2778

CODEN CKHPD7

中国科学技术大学学报

第 22 卷 第 4 期

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 22 No. 4

4

1992

中国科学技术大学学报

第 22 卷 第 4 期 (总第 79 期)

目 录

若干型实二次域的类群.....	张贤科(393)
基于液晶测温技术的二维热传导自动分析.....	汪柳生 何世平 伍小平(396)
光线跟踪生成三维真实感景物.....	吴建华 孙贞寿(403)
西藏地壳模型及其化学成分初探.....	黎 彤 李 峰(409)
复合材料等效导热系数的理论推算.....	陈则韶 钱 军 叶一火(416)
超高分子量聚乙烯凝胶结晶膜的结晶形态 X 射线衍射研究	周贵恩 朱清仁 高建峰 戚嵘嵘 洪昆仑 叶朝辉(425)

研究简报

关于 Roth 分布不等式的一个推广	孙 衡 徐延志(432)
表自然数为两个无平方因子数的和	余红兵 王巧林(440)
复合区间消去法在优化 $BaBr_2 : Eu$ 制备条件中的应用	陆肖璞 吴耿锋 周佩玲 施朝淑(445)
可见光波段发光多孔硅膜的结构特征研究	赵特秀 吕智慧 孙国喜 叶 坚 王晓平 刘磁辉 吴自勤(450)
用碰撞络合物模型计算 $CH(A^2\Delta)$ 电子态猝灭截面	余忠华 陈从香 陈嵘嵘(455)
小幅振动旋成体跨音速绕流的数值分析.....	陆夕云 夏 南 庄礼贤(461)
正交设计法在无火焰 AAS 中的应用	张 巽 高卫民 陶先刚 王振杰(468)
雄兔背部皮下埋植慢释放雄激素药物的实验	刘瑞芝 李希明 雷少琼 陈文明 单春华 董勇治 韩 萍 赵 钢 郑 力(475)
烟气顶蓬射流非稳态温度场的分析计算.....	袁理明 霍 然 陈 莉(480)
智能式自动逻辑综合系统 KDLS	何中礼 庄镇泉(486)
正电子湮没辐射一维角关联实验的图示拟合软件	霍剑青 王晓蒲 蒋惠林 张志诚(492)
多元线性回归模型中的经验 Bayes 检验	张顺普(498)

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 22 No. 4 (Sum No. 79)

CONTENTS

- Class Groups of Certain Real Quadratic Fields *Zhang Xianke*(393)
- Automatic 2D Heat Transfer Analysis Based on Liquid Crystal Thermography Technique
..... *Wang Liusheng, He Shiping, Wu Xiaoping*(396)
- Generating 3D Realize Scene With Ray-Tracing *Wu Jianhua, Sun Zhenshou*(403)
- A Preliminary Research on the Model of Xizang(Tibet) Continental Crust and Its Chemical
Composition *Li Tong, Li Peng*(409)
- Predicting Theory of Effective Thermal Conductivity of Complex Material
..... *Chen Zeshao, Qian Jun, Ye Yihuo*(416)
- X-Ray Diffraction Study for Morphology of Ultra-High Molecular Weight Polyethylene
Produced by Gelation/Crystallization
..... *Zhou Guien, Zhu Qingren, Gao Jianfeng, Qi Rongrong, Hong Kunlun, Ye Zhaohui*(425)

Research Notes

- A Generalization of Roth Inequality on Distribution *Sun Heng, Xu Yanzhi*(432)
- On the Representations of a Number as a Sum of Two Square-free Numbers
..... *Yu Hongbing, Wang Qiaolin*(440)
- The Applications of Combined Region Elimination Method to Optimization of Preparation
Conditions of $BaBr_2 : Eu$ *Lu Xiaopu, Wu Gengfeng, Zhou Peiling, Shi Chaosu*(445)
- Structure Characteristic of Porous Silicon Films with Visible Photoluminescence
..... *Zhao Tezhu, Li Zhihui, Sun Guoxi, Ye Jian, Wang Xiaoping, Liu Cihui, Wu Ziqin*(450)
- Calculation of Collisional Quenching Cross Sections of $CH(A^2\Delta)$ by Some Molecules Using
Collisional Complex Model *Yu Zhonghua, Chen Congxiang, Chen Rongrong*(455)
- Numerical Analysis of Transonic Flow Around Oscillating Bodies of Revolution With
Small Amplitudes *Lu Xiyun, Xia Nan, Zhuang Lizian*(461)
- Application of Orthogonal Design in Graphite Furnace Atomic Absorbtion

- *Zhang Xun, Gao Weimin, Tao Xiangang, Wang Zhenjie*(468)
Experimental Study of Transplanted Region of Testicular Prosthesis in Vivo
- *Liu Ruizhi, Li Ximing, Lei Shaoqiong, Chen Wenming,*
Shan Chunhua, Dong Yongzhi, Han Ping, Zhao Gang, Zheng Li(475)
Computation of Non-steady Temperature Field of Smoke Ceiling Jet
- *Yuan Liming, Huo Ran, Chen Li*(480)
An Intelligent Automatic Logic Synthesis System KDLS *He Zhongli, Zhuang Zhengquan*(486)
Plot Fit Software for Angular Correlation Positron Annihilation Radiation
- *Huo Jianqing, Wang Xiaopu, Jiang Huilin, Zhang Zhicheng*(492)
Empirical Bayes Test in a Multiple Linear Regression Model *Zhang Shunpu*(498)

Class Groups of Certain Real Quadratic Fields

Zhang Xianke

(Department of Mathematics)

Abstract

Suppose a real quadratic field $K = \mathbb{Q}(\sqrt{m})$, $m = s^2 + r$. If $r|4s$, then K is said to be of ERD-type. This paper studies the cases $r|6s$ and $r|8s$, and gives some results of class group $H(m)$ and class number $h(m)$ of K . For example: if $m = (8n + 5)^2 + 8$, then $(2, (1 + \sqrt{m})/2)$ is a principal ideal, it is more likely that $h(m) = 1$; If $m = s^2 + 8t, s/t \in \mathbb{Z} - 2\mathbb{Z}$, then the order of $A = (2, (1 + \sqrt{m})/2)$ in $H(m)$ is 1, 2 or 4; if class $A^2 \neq 1$ then $4|h(m)$; If $m = (3z^2 + t - 3)^2/4 + 3t, t|z^2 - 1$, then on a certain condition, $H(m)$ contains a cyclic subgroup of order n . The method of proof of these results is similar to that of the ERD-type.

Key words: quadratic number field, class group, class number

AMS Classifications (1991): 11R21, 11R29

Let $K = \mathbb{Q}(\sqrt{m})$ be a real quadratic field over the rationals \mathbb{Q} , where $m = s^2 + r$ is a square-free positive integer, $s > 0, r \in \mathbb{Z}$ are integers. If $r|4s$, then m and K are said to be of ERD-type, which have been studied in many literatures including [1], [2] and [3]. We here will study the cases $r|6s$ and $r|8s$. In these cases, the results can't be as neat as those for the ERD-type in [1-3]. We let $H(m)$ and $h(m)$ denote the class group and class number of K . Let $[(a, b)]$ denote the ideal class in $H(m)$ represented by the ideal (a, b) , and let $a \in \mathbb{Z} - n\mathbb{Z}$ mean $a \in \mathbb{Z}$ but $a \not\equiv 0 \pmod{n}$.

Theorem 1 Let $m = (8n + 5)^2 + 8$ or $m = (8n + 7)^2 + 8, n > 3$. Then the ideal $(2, (1 + \sqrt{m})/2)$ is principal.

Theorem 2 Let $m = s^2 + 8t, s/t \in \mathbb{Z} - 2\mathbb{Z}, 0 < 8t \leq 2s, s > 15$. Then the order of the ideal class A

$= (2, (1 + \sqrt{m})/2)$ is 1, 2 or 4. In Particular, if $A \neq 1$ then $2|h(m)$; if $A^2 \neq 1$ then $4|h(m)$.

Theorem 3 Let $m = s^2 + 3t$, $2s/t \in \mathbb{Z} - 3\mathbb{Z}$, $-s < 3t \leq 2s$, $s > 11$. Then the order of the ideal class $A = [(3, s + \sqrt{m})]$ is 1 or 2. In particular, if $A \neq 1$, then $2|h(m)$.

Similarly to [1], we can also determine certain subgroups of $H(m)$. But here we will usually need the equations

$$x^2 - my^2 = \pm 4^i z^i \quad (1 \leq i | n, i < n) \quad (1)$$

have no proper solution ($\delta = 0$ or 1). This condition is equivalent to $\pm 4^i z^i \neq c_j$ ($0 < j \in \mathbb{Z}$), where $c_j = 2sA_j B_j - B_j^2 r + A_j^2$, A_j and B_j are polynomials in $\mathbb{Z}[t_1, t_2, \dots, t_j]$ defined inductively by $A_j = t_j A_{j-1} - A_{j-2}$, $B_j = t_j B_{j-1} - B_{j-2}$, $A_0 = 1$, $A_1 = t_1$, $B_0 = 0$, $B_1 = 1$, and $m = s^2 + r$ for arbitrary s, r in \mathbb{Z} .

Theorem 4 For each m listed in the following, the ideal class group $H(m)$ has a class A with $A^n = 1$. In particular, $H(m)$ contains a cyclic subgroup of order n (and then $n|h(m)$) if equation (1) has no proper (integer) solution. (z denotes any odd integer in \mathbb{Z} , $t \in \mathbb{Z}$).

$$(1) \quad m = (3 \cdot 4^i z^i \pm (t - 3))^2 / 4 + 3t, \quad t | 4^i z^i \mp 1, \quad |t| < 3 \cdot 4^i z^i / 7, \quad z^i > 8.$$

$$(2) \quad m = (3 \cdot 4^i z^i - t + 12)^2 / 16 + 3t, \quad t | 4^i z^i + 4, \quad -3 \cdot 4^i z^i / 11 - 1 < t < 32 \cdot 4^i z^i / 7 + 1,$$

$$4^i z^i > 21.$$

$$(3) \quad m = (3z^i + 4t - 3)^2 / 16 + 3t, \quad t | z^i - 1, \quad 0 < t < 3z^i / 2 - 1, \quad z^i > 10.$$

$$(4) \quad m = (3z^i + 4t + 3)^2 / 16 - 3t, \quad t | z^i + 1, \quad 0 < t < 3z^i / 8, \quad z^i > 8.$$

Theorem 5 For each m listed in the following, the ideal class group $H(m)$ has a class A with $A^n = 1$. In particular, $H(m)$ contains a cyclic subgroup of order n , and then $n|h(m)$, if equation (1) has no proper solution (z denotes any odd integer in \mathbb{Z} , $t \in \mathbb{Z}$).

$$(a) \quad m = (2z^i \pm t \mp 2)^2 + 8t, \quad t | z^i \mp 1, \quad 0 < t < 2z^i / (4 \mp 1) - 1.$$

$$(b) \quad m = (2z^i - t + 18)^2 / 9 + 8t, \quad t | z^i + 9, \quad 0 < t < 2z^i / 13 + 1.$$

$$(c) \quad m = (2z^i + 9t - 2)^2 / 9 + 8t, \quad t | z^i - 1, \quad 0 < t < 2z^i / 3.$$

The method used to prove the above theorems is similar to that in [1-3] involving continued-fraction-theory and Diophantine equations with much computation.

References

- [1] Zhang Xianke, The determination of subgroups in ideal class groups of real quadratic fields, *Chinese Science Bulletin*, 36(1991), No. 24, 1847-1849. (中文版)
- [2] Zhang Xianke, Solutions of the Diophantine equations related to real quadratic fields, *Chinese Science Bulletin* 36 (1991), No. 23, 1772-1775. (中文版)
- [3] Zhang Xianke, Problem of class numbers $h(K) = 1$ for real number quadratic fields, *Chinese Science Bulletin*, 37 (1992), No. 24, 1932-1934.

若干型实二次域的类群

张贤科

(数学系)

摘 要

设实二次域 $K = \mathbf{Q}(\sqrt{m})$, $m = s^2 + r$. 若 $r|4s$, 则 K 称为 ERD 型. 本文研究了 $r|6s$ 或 $r|8s$ 的情形, 给出了 K 的类群 $H(m)$ 和类数 $h(m)$ 若干结果. 例如若 $m = (8n + 5)^2 + 8$, 则 $(2, (1 + \sqrt{m})/2)$ 是主理想, $h(m) = 1$ 的可能较大; 若 $m = s^2 + 8t, s/t \in \mathbf{z} - 2\mathbf{z}$, 则 $A = (2, (1 + \sqrt{m})/2)$ 在 $H(m)$ 中阶为 1, 2, 或 4, 若类 $A^2 \neq 1$ 则 $4|h(m)$; 若 $m = (3 \cdot z^t + t - 3)^2/4 + 3t, t|z^t - 1$, 则在一定条件下 $H(m)$ 含 n 阶循环子群. 证明方法与作者在 ERD 型的若干工作类似.

关键词: 二次数域, 类群, 类数

中图法分类号: O156.2

基于液晶测温技术的二维热传导自动分析

汪柳生 何世平 伍小平

(近代力学系)

摘 要

建立了一套瞬态和稳态均通用的基于液晶测温 and 图像处理技术的二维传热自动分析软件系统。文中描述了液晶测温技术和液晶温度显示图的分析原理,以及软件系统的结构和操作等。还就该技术的优点、缺点和将来的发展进行了讨论。

关键词: 液晶测温, 传热, 图像处理, 自动分析。

中图分类号: O551.2

1 前言

液晶测温技术用于传热分析已有多年历史^[1-4]。但在国内,这方面的研究报道极少。将测温用的液晶材料涂在物体表面上,其颜色将随着物体表面温度的改变而变化。一种确定的液晶材料只在一个较窄的温度范围内呈现各种颜色变化。高于或低于此温度范围,液晶不呈现任何色彩。

应用液晶测温技术进行传热分析,通常是测量物体温度随时间的变化过程。当对被测物体的某一部分逐渐加热时,由于热量的传递,物体表面上各点的温度将随时间发生变化。一旦某点的温度达到液晶的转变温度(T_c)时,该点附近会出现彩虹带。彩带随物体表面各点温度变化而在物表面上移动。在定量测量中,常常是选择某一特定的颜色进行标定。实验时,只要用录相机记录下色彩随时间在物体表面上的移动过程,就可以求出传热系数等值。

在液晶测温实验中会遇到大量的等色图像需处理。常规的做法是边放录相机读取特定颜色条纹在物体表面上的位置。先在物体表面安放一只直尺,来读取条纹位置。时间由录相机

给出。这种人工读取等色条纹位置的做法,不仅费时、费事,且读数精度也不高。因此,必须研究液晶测温等色图的自动分析和处理。

与干涉条纹图不同的是,液晶测温等色图总是附在试件轮廓的背景上,这就给图像的自动分析和处理带来困难,因为图像系统很难自动区别等色(等温)线和试件的轮廓线。

本文建立了一套瞬态和稳态均通用、基于液晶测温和图像处理技术的二维传热自动分析的软件系统。系统中采用图像相减法,巧妙地抑制了试件轮廓背景对等色图的干扰,大大提高了等色图的信噪比,解决了液晶测温等色图的自动分析和处理。

2 液晶测温技术及原理

液晶是介于固态晶体和各向同性液体之间的一种中间相,它同时具有晶体和液体的某些特性。其外型类似于流体,具有流动性及粘滞性,而其分子结构又类似于晶体,具有有规律的分子排列,呈现光学各向异性。

液晶可以通过加热某些结晶固体而得到,也可以由某些材料的各向同性液体在冷却过程中获得。它有两个明显的熔点(称为转变温度,用 T_c 表示),液晶仅是介于这两个熔点之间的一种过渡相。据报道,有数千种有机化合物在加热或冷却过程中能形成液晶相。

液晶的种类很多,用于温度显示的液晶主要是热致液晶(还有溶致液晶)中的胆甾相。该液晶的柱状分子分层而整齐地排列,在每一层中,分子的长轴互相平行,且平行于层面。但对于不同的层面,长轴方向按螺旋线而缓慢地变化。胆甾相液晶由于具有这种层状、扭曲型的分子结构,使其具有很强的旋光性和圆二向色性等光学性能。

胆甾相液晶的圆二向色性,使得白光照射到液晶上能分成旋向相反的两束圆偏振光,一束反射,一束透射。反射光波的频率与分子层间距有关,当温度变化造成分子层间距改变时,液晶所选择的反射光频率也随之变化,从而呈现出一系列的色彩变化。某种颜色都与一定的温度相对应,根据所呈现的颜色,就能准确地测定出物体的温度。

测定温时必须预先在物体表面上喷涂薄层胆甾相液晶材料。但测温用液晶对确定的温度必须呈现出某一特定的颜色。如单一材料满足不了,可以用几种液晶的混合物来补偿。为了得到反差好的等色图,物体表面需先涂成无光黑色,然后再喷射液晶材料。

液晶呈现的某一色彩所对应的温度值必须事先标定。标定时要注意观察角不同反射光的颜色也不同。

3 实验装置

图1是一个瞬态传热装置示意图。试件在快速引入热空气流后,在风洞的出口端被加热。试件是一个有机玻璃制成的圆管,其内外直径分别为90mm和100mm。试件和测试装置间安装了一开关电路,用以控制瞬态测量过程的起始时间。用于采集图像的CCD摄像机放在与试件纵轴垂直的方向上,定量测量时在摄像机镜头前安置一个窄带干涉滤波器。

图2所示是一个采用恒温加热法的稳态传热装置图,恒温由自动温度控制器控制的水温来保证。一个常温的空气射流从被测表面的正面垂直冲击到试件表面上,CCD摄像机只能从

稍微倾斜的方向摄像。

用作温度指示剂的液晶材料是一种微胶囊状的胆甾相液晶,型号为 BM/R35C1W/C17-10. 其绿色转变温度 T_c 为 35.5°C , 彩色带宽为 1.0°C , 颜色分辨率可达 0.1°C .

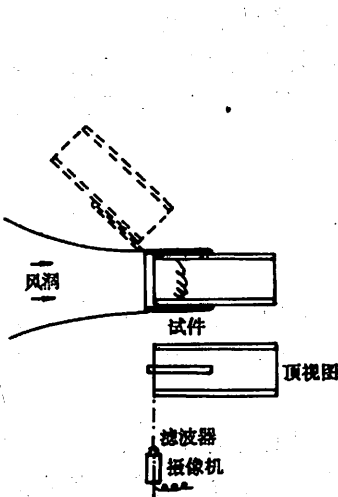


图 1 瞬态传热装置示意图。

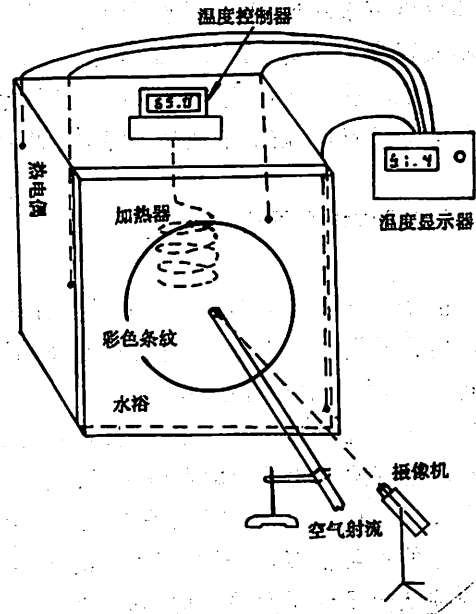


图 2 恒温加热稳态传热装置

试件表面涂成无光黑色后,用特制的小喷枪将液晶材料水溶液喷射到被测试件表面上. 液晶材料的水溶液可按 1:3 的比例配制. 为了分布均匀,通常从几个不同的方向喷涂 3—4 薄层. 待液晶材料干燥后,再用细毛刷刷去表面上多余的、未能与表面结合在一起的零星颗粒.

4 数据采集和分析系统

实验数据采集和分析系统示意图见图 3. 该系统由 CCD 摄像机、专业录相机、IBM-AT 兼容机(内含单色图像板)和带有 R. G. B 输入端口的伪彩色图像显示器所组成. 图像板为 DT2862 型,可存贮四帧 $512 \times 512 \times 8\text{-bit}$ 的图像. 应用特定软件可在 PC 机的内存中开辟多达 64 幅的额外帧存.

图 4 所示为简单的软件操作流程,软件的操作是建立在多层菜单的驱动基础上的. 瞬态测量中的图像采集,是通过自动判别等温图从一帧到另一帧的移动位置来完成的. 此外,也可预先设置帧与帧之间的时间间隔. 与此类似,在稳态测量中,稳态的传热状态也是由软件系统自动判别和采集的.

在瞬态测量过程中,传热起始时间的控制是非常重要的,尤其在 Jet Impingement 等的高雷诺数情况下更是如此. 为使这一过程自动化,在试件和测试装置之间安置了一个开关电路. 当试件被快速引入流场中时,开关的开、闭状态的改变会产生一个电脉冲. 这样的时间序列信

号可用照相机的音频通道记录下来,最后由计算机进行分析.在录相带的重放过程中,配置在计算机中的 A/D 板直接对音频信号进行采集和分析.软件系统中有一个“比较”子程序专门用于完成这一功能.

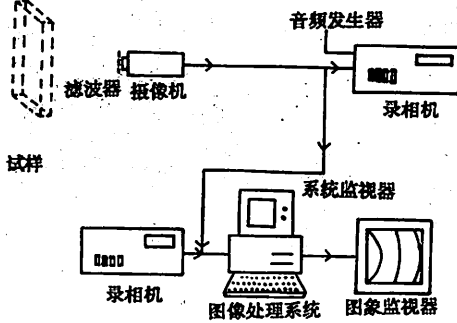


图 3 实验数据采集和分析系统示意图

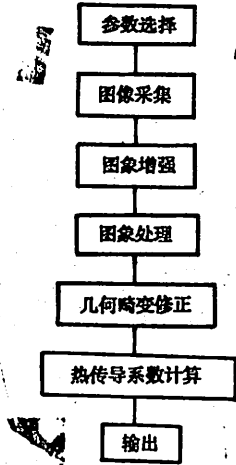


图 4 软件操作流程简图

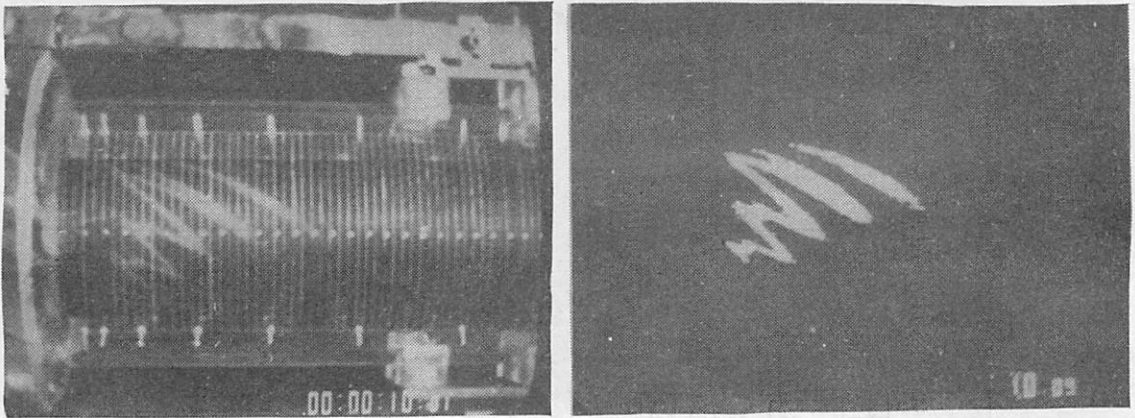
在定量测量过程中,需在摄像机镜头前安置一个窄带干涉滤波器,其中心频率所对应的温度可事先标定.由于窄带滤波器的使用,使得实际记录的等温图变成单色图,而不是彩色条纹图.

对于一些轮廓背景比较复杂的试件,由于轮廓背景的存在使得图像系统很难自动区别轮廓线和等温线.为了排除这种轮廓背景对等温图的干扰,可在摄像机和录相机之间增加一个实时图像相减器.相减器的功能是将 CCD 摄像机摄取的液晶等温图与色彩出现前的试件原始轮廓图实时相减,并将相减结果实时存入录相机.借助图像相减器的转换,实验所获得的等色图已基本消除了试件原始轮廓背景的干扰.两幅图像相减,只减去两幅图像中共同存在的部分,即试件的轮廓背景,而对欲测信息毫无影响.但实际上由于环境及多种因素的干扰,不可能使轮廓背景完全消除.微弱背景的存在不会影响图像的自动识别,却可作空间定位用.

对液晶等温图的分析比干涉条纹图的分析要简单.这是因为准单色等温线不存在条纹阶数的判读问题,只有一阶条纹(一种特定颜色,对应着一个温度).此外,实验又只关心等温线中心所在的位置坐标.因此,只要用二值化程序将条纹细化处理,然后读出条纹中心位置的坐标就行.对于时间的确定,可由计算机直接从录相机中读出.在测出了温度随时间在表面上的变化以后,再根据相应的导热模型和计算公式就可以进行最后的传热分析.

5 实验结果

图 5 显示了带有旋流的瞬态传热过程中的一个典型的等温图.其中(a)是准单色等温图,等色线中心位置的温度为 35.5℃; (b)是经过相减处理后的等温图,已消除了试件轮廓背景.该等温图是试件导入流场后 10 秒钟时采集到的液晶等色图.热气流的温度为 65℃,试件本身的初始温度为 21.2℃.

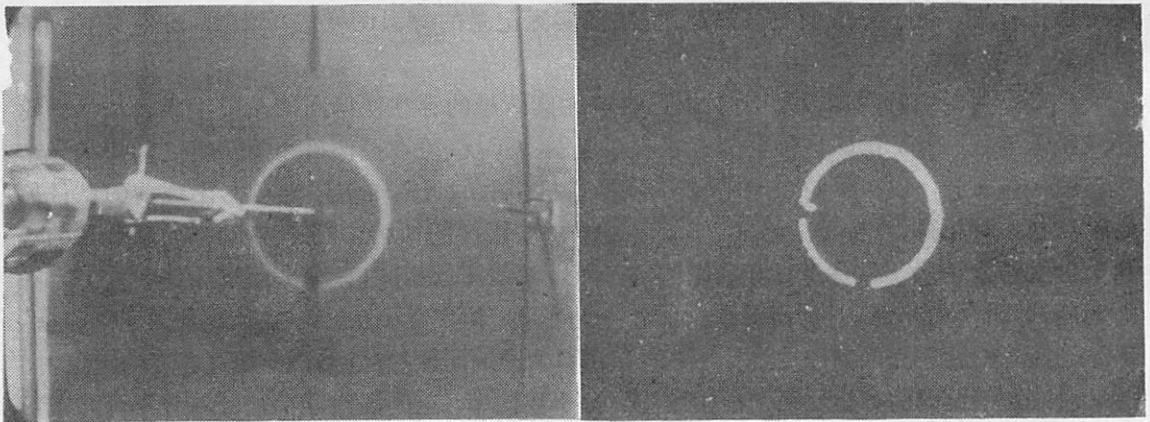


(a) 准单色等温图

(b) 相减处理后的等温图

图 5 带有旋流的瞬态等温图 ($t=10$ 秒)

图 6 所示是恒温加热稳态传热中的一个典型的液晶测温等温图. 其中(a)是准单色等温图, 转变温度为 35.5°C , (b)是经过相减处理后的无轮廓背景等温图. 水温为 50.0°C , 空气射流温度为 21.3°C , $\text{Re}=76000$.



(a) 准单色等温图

(b) 相减处理后的等温图

图 6 稳态传热中的一个等温图

6 结论和讨论

本文开发了一套基于液晶测温和图像处理技术的传热分析软件系统. 该软件系统已成功地应用于一系列二维几何状态下的瞬态和稳态传热现象的分析. 多层菜单驱动原则使得该系统极易使用和操作.

数字图像相减技术的引进, 有效地抑制了试件轮廓背景对液晶等温图的干扰, 使得图像系统自动采集、处理和分析液晶等温图得以实现. 这不仅加快了液晶测温传热分析的速度(由几

个小时的工作缩为几分钟),而且提高了测试精度。

二维数字中值滤波对减弱二值化后的图像上的噪声点非常有效,而且又能很好地保持图像的边界。这就使得对准单色条纹中心的定位更加准确。

基于逻辑比较运算法而不是算术式判别和累计像素法,可以加速等温线的扫描及定位,这一效果对于扫描整幅图像尤其明显。二维中值滤波耗时较长,文献[5]提出了一种可以大大加速的方法,但需要额外的硬件。鼠标驱动和自学习功能可以加入到软件系统中去,以使之更加完善。

单色图像系统只能利用液晶彩色图的一部分信息,这固然有它的长处,但也确实浪费了很多有用的信息。进一步研究液晶测温彩色条纹中全色彩的充分利用,无疑是很有意义的工作。利用液晶测温,只能测量一个很窄范围内的温度分布,高于或低于液晶转变温度时就无法显示,这是液晶测温技术的一大不足之处。

基于所提出的原理,开发三维传热自动分析软件系统是可行的,但必须与其它技术相配合,如形状测量技术等。此外,液晶测温技术也可能在液体温度测量和流场显示中发挥作用。

感谢英国煤气公司和英国诺丁汉理工学院对本文工作的资助。

参 考 文 献

- [1] Cooper T E, Field R J and Meyer R J, Liquid-crystal thermometry and its application to the study of convective heat transfer, *Trans. ASME, J. Heat Transfer*, 97(1975), 442-450.
- [2] Edwards R J, Enhancement of heat transfer in smooth annular ducts using longitudinal fins or swirling flow, *PhD thesis to CNAAB, Trent Polytechnic Nottingham*, 1987.
- [3] Akino N, Kunugi T, Ichimiya K, Mitsushiro K and Ueda M, Improved liquid crystal thermometry excluding human color sensation Part I: Concept and calibration, *ASME Winter Meeting, Anaheim, California*, 1986, 57-62.
- [4] Akino N, Kunugi T, Ichimiya K, Mitsushiro K and Ueda M, Improved liquid crystal thermometry excluding human color sensation Part II: Application to the determination of wall temperature distributions, *ASME Winter Meeting, Anaheim, California*, 1986, 63-68.
- [5] Karaman R and Onural L, New radix-2-based algorithm for fast median filtering, *Electronics Lett.*, 25(1989), No. 11, 723-4.

Automatic 2D Heat Transfer Analysis Based on Liquid Crystal Thermography Technique

Wang Liusheng He Shiping Wu Xiaoping

(University of Science and Technology of China)

Abstract

A 2D heat transfer automatic analysis software system based on liquid crystal thermographs and digital image processing technique has been developed for both the transient state (TS) and steady state (SS). Principles of liquid crystal thermography and analysis of the thermographs, together with the structure and operation of the software are described. Typical test results for both transient and steady states are presented. Advantages, limitations and future development of the technique are discussed.

Key words: liquid crystal thermography, heat transfer image processing, automatic analysis

光线跟踪生成三维真实感景物

吴建华 孙贞寿

(无线电电子学系)

摘 要

将全局光照模型和球冠光源模型结合起来,利用光线跟踪算法实现了由 CSG 树定义的任意复杂物体的真实感图形生成,模拟了阴影、透明、反射等多种效果,生成的画面具有很强的真实感,并利用包围框大大减少了计算量。

关键词: 三维景物生成,光线跟踪,三维显示

中图法分类号: TP391

计算机生成真实感景物是计算机图形学研究的重要课题。它综合利用数学、物理学、计算机科学、色度学和其它学科的理论成果,随着计算机图形处理器和高分辨率光栅图像显示器的普及,真实感景物生成技术日益受到人们的重视。

1 光线跟踪计算可见点

要生成一个景物,首先必须建立物体的模型,也就是要建立它的数据结构。本文所用的数据结构为 CSG 树(Constructive Solid Geometry)。它由立方体、球体、圆锥体、圆柱体和圆环体五种基本体素通过布尔运算构成。

一个三维物体的观察过程就是对它进行投影的过程。在利用光线跟踪算法^[1,2]计算光线与物体的交点时,必须首先求出光线与每一个体素的相交情况,一条光线与立方体、球体、圆锥体和圆柱体这四种体素相交的情况有以下四种:

- 1) 光线与体素没有交点,

- 2) 光线与体素相切,也即只有一个交点,
- 3) 光线与体素有两个交点,
- 4) 光线从体素的一个面上经过,这时有无穷多个交点.

在第一、二种情况下,我们说光线和该体素没有交点,在第三、四种情况下,我们则说光线与该体素相交了,这时光线相对于该体素可以分为三段:外—里—外.

圆环体和上面四种体素就不一样了,一条光线和它可以相交于一个点、两个点,也可能有三个或四个交点,所以这时一条光线相对于一个圆环体可以分为:外;外—里—外;外—里—外—里—外.

为了表示一条光线进出物体的情况(也就是和物体相交的情况),我们定义了下面的数组:

光线参数: $t[0], t[1], \dots, t[n-1]$

光线状态: $v[0], v[1], \dots, v[n]$

表面指针: $s[0], s[1], \dots, s[n-1]$

光线参数 $t[i]$ 代表了交点离观察点的距离,光线状态 $v[i]$ 表示了光线进出物体的情况, $v[i]=0$ 就表示了 $t[i-1] \sim t[i]$ 之间光线在物体之外, $v[i]=1$ 则表示该段光线在物体之内,表面指针指向交点处表面的一系列参数(如反射率、折射率、透射率等). 通过这三个数组我们可以清楚地描述出一条光线与物体相交的情况,第一个交点就是可见点,对应的表面指针 $s[0]$ 就提供了我们计算该点明暗度的信息.

但由于我们所采用的物体数据结构是用若干个基本体素通过布尔运算来表示的,最后物体的形状在数据结构中并没有直接反映出来. 为了得到可见点,就必须从该光线和构成物体的所有体素求交开始,并对光线与构成物体的体素及复合体相交的情况进行运算. 为了得到一条光线和物体相交的情况,我们采用了过程 `linenode` 返回光线与一个结点相交的状况,它从根结点开始采用递归至叶结点为止,使用过程 `combine` 完成左、右结点相交状况的结合运算,对交点的结合运算可分为三步进行:

- 1) 左、右结点的所有交点一起排好序,这些交点将光线分为若干段.
- 2) 对每段光线按照“+”、“-”、“&”运算的规则确定其是在物体内部还是在物体外部.
- 3) 将相邻段性质一样(即同在物体内部或同在物体外部)的段合成一个段.

这样我们就将左、右结点的交点结合完毕. 当求得了光线与根结点的相交情况时,也就找到可见点了.

2 可见点光强的计算

我们采用自然球冠光源模型^[3,4]计算可见点的光强度. 自然球冠光源模型认为自然光源的几何形状是一个球冠面,当太阳光通过大气层时,太阳辐射能转换成以一定密度的网格状点光源分布在该球冠面上,每个点光源又由透射光和散射光两部分组成,通过引入量度因子和云层密度分布函数的概念,比较好地模拟了不同气候条件下的光照效果^[5].

为了获得逼真的生成效果,还必须选择一个合适的光照模型,在本文中我们采用了 Whit-

ted 全局光照模型^[6],其计算公式为

$$I = K_d \sum_i I_{u_i} (N \cdot L_i) + K_r \sum_i I_{u_i} (V \cdot R_i)^n + K_o I_o + K_s I_s + K_t I_t \quad (1)$$

这里 K_d 为物体表面的漫反射系数, K_r 为镜面反射系数, K_o 为对周围泛光的漫反射系数, K_t 为物体的透射系数, n 为物体表面的会聚指数, N 为物体表面的法向量, V 为观察方向矢量, L_i 为一点光源的入射矢量, R_i 为相应的镜面反射方向矢量, I_{u_i} 为点光源的光强, I_o 为环境泛光光强, I_s 、 I_t 分别为沿镜面反射方向到达景物表面和逆折射方向到达景物表面并投射到观察者眼中的光线强度。

要计算一个点的光强,首先必须看该点是否处在太阳光的直接照射之下,这样我们可以把所有可见点划分为以下两种情况:

1. 太阳辐射直接照射到。
2. 处于太阳光的阴影中,也即被自己或其它物体所遮挡。

对第一种类型点光强的计算可按下式进行

$$I = K_o \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M I_{\mu}(i, j) + K_s \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M I_{\mu}(i, j) \times \cos(r, m) + K_r \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M I_{\mu}(i, j) \times \cos^2(l, m) + K_o I_o + K_t I_t \quad (2)$$

其中 $I_{\mu}(i, j)$ 和 $I_{\nu}(i, j)$ 分别为球冠上点光源的散射分量和透射分量, r 为球冠上点的外法向量, l 是太阳的辐射方向, m 是物体表面的法向量。

对于第二种点的计算则比较复杂,为了计算这时可见点的照度,必须确定球冠面上有多少个点光源可以直接照射到该可见点,其它的点光源则被该可见点所在的物体或其它物体挡住了,使它们不能直接照射到可见点。但仅有此还不够,很显然遮挡可见点的物体的性质对可见点的照度也很有影响,一透明体遮挡住可见点和非透明体遮挡住可见点就大不相同,为了描述这种情况,我们引入了遮挡函数 $g(i, j)$, 定义如下

$$g(i, j) = \begin{cases} 0 & \text{点光源}(i, j) \text{ 到可见点之间至少有一个非透明体} \\ 1 & \text{点光源}(i, j) \text{ 到可见点之间没有物体} \\ a & \text{点光源}(i, j) \text{ 到可见点之间有几个透明物体}(0 \leq a \leq 1) \end{cases} \quad (3)$$

在计算可见点光强时,必须对散射光和透射光作不同的处理,由于散射光无方向性,故它对任意可见点均有相同的贡献,所以遮挡区对计算散射光强不产生影响,而只影响透射光强,并且这时镜面高光也不复存在,具体计算公式为

$$I = K_o \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M I_{\mu}(i, j) + K_s \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M g(i, j) I_{\nu}(i, j) \times \cos(r, m) + K_o I_o + K_t I_t \quad (4)$$

3 透明体和反射面的生成

光线跟踪的最大优点就是能模拟光线在物体之间的多次反射和折射,所以能产生出很逼真的透明和反射效果。我们首先从跟踪一条视线开始,当视线遇到一个物体时,我们就说这时

第一个交点是可见点,为了计算该点的光照度,我们要用同样的方法跟踪该物体对视线的镜面反射线和对视线的折射线.这种跟踪一直到所跟踪的光线与我们所考虑的所有物体永不相交为止.

我们对光线跟踪树的深度是采用自适应的方法进行控制的.一节点对根节点光强的贡献是该节点的光能量与光线所经过各点的反射率和透射率的乘积,设视线经 M 次反射和 N 次透射后到达节点 K ,则节点 K 对根节点的光能量贡献为

$$E_{\text{root},k} = \prod_{i=1}^M R_i \prod_{j=1}^N T_j \cdot E_k \quad (5)$$

这里 R_i, T_j 为物体的反射率和透射率.若我们已知 E_k 的最大值为 $E_{k\max}$,且认为能量的最小量化级为 E_0 ,则当满足

$$\prod_{i=1}^M R_i \prod_{j=1}^N T_j < \frac{E_0}{E_{k\max}} \quad (6)$$

时,我们就可以不再跟踪节点 K 以后的光线了,在本文中因所采用的灰度级为 256,所以选定在 $\prod_{i=1}^M R_i \prod_{j=1}^N T_j < \frac{1}{256}$ 时不再进行光线跟踪.

4 使用包围框加快光线跟踪速度

在计算光线与物体求交的过程中,我们必须把光线与所有结点(包括叶结点和内部结点)进行求交,甚至当光线很明显与物体不相交时也要进行,这就大大降低了光线跟踪的效率.为了能把明显与物体不相交的光线区分出来,我们须把物体在空间的范围用一定的方法表示起来,只当光线经过这个范围时我们才进行光线与物体的求交运算,光线不经过这个范围时光线与物体肯定不相交,也就不必进行求交运算.鉴于本文所使用的数据结构,物体位置、形状、大小等信息都存储在叶结点中,内部结点中只有其左、右子结点的运算方式,所以要确定物体的范围必须从叶结点开始,然后逐级确定内部结点的范围,最后才能得到根结点的范围.

我们采用在观察坐标系中投影屏幕上定义的边与坐标轴平行的矩形来表示物体的范围,当我们从视点看物体时,物体全部在这个矩形内,所以我们把这个矩形叫做物体的包围框,在选择包围框时必须是表示物体范围的最小矩形.一个包围框只需用 4 个参数就可以确定,也就是它最小和最大的横坐标和纵坐标: min-point-X、min-point-Y、max-point-X 和 max-point-Y. 这些信息存储在数据结构的每个结点中,包括内部结点和叶结点.在本文中我们没有用到 Z 方向的信息是因为我们总是假定光线从视点开始一直延伸到无穷远处,当光线被限制在一定的深度时,只需简单的加上 Z 轴的最大深度信息 ray-depth,当

$$\text{min-point-z} \leq \text{ray-depth} \quad (7)$$

时则对该光线与该结点作求交运算.

由于当观察空间改变时,物体的包围框也随着改变,所以我们对同一物体在不同的观察过程中都要重新计算它的包围框,这个过程就象前面的过程 linenode 一样也是一个递归过程:从树的根结点开始,向下调用直到计算叶结点的包围框,然后逐级返回通过包围框的结合运算得

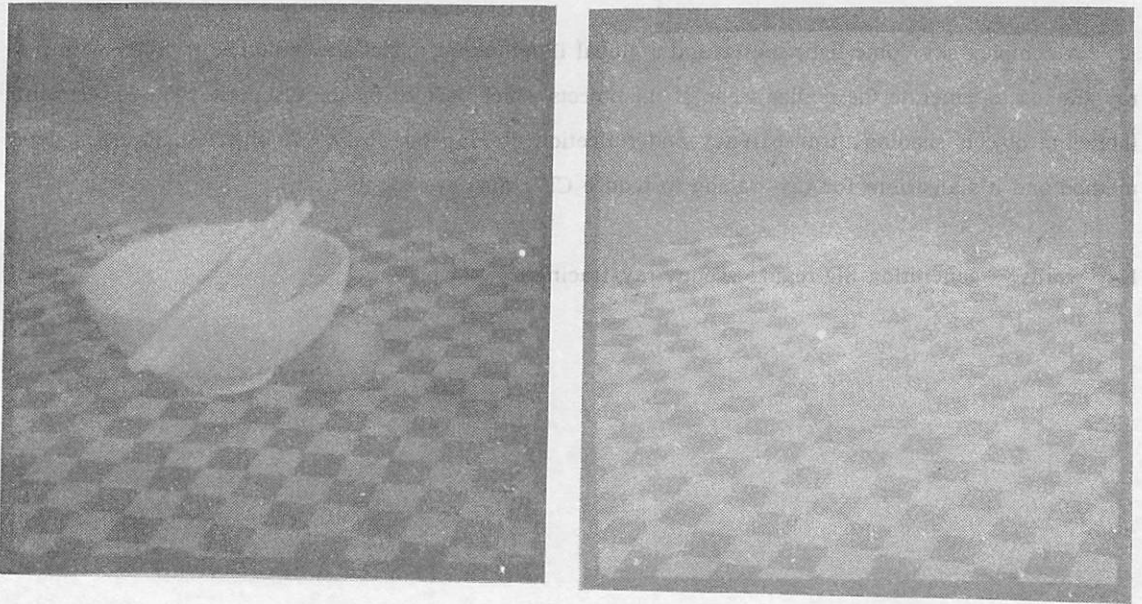
出内部结点的包围框。

5 总结

本文在研究了光线跟踪算法的基础上,应用了比较接近自然的球冠光源模型,实现了由 CSG 树定义的任意复杂物体的三维真实感显示,并模拟了阴影、透明、反射等效果,使得生成的画面具有很强的真实感。对物体加上包围框并实现了包围框之间的运算,也大大减少了光线跟踪算法的计算量。

附图照片为采用上述算法生成的真实感景物,全部程序用 C 语言写成,在 VAX-8700 上实现。

附图 由多个基本体素构成的复杂物体的生成结果



参 考 文 献

- [1] Roth S D, Ray casting for modeling solids, *Computer Graphics and Image Processing*, 18 (1992), NO. 2.
- [2] [美]D. F. 罗杰斯著,梁友栋、石教英、彭群生译,计算机图形学的算法基础,科学出版社,1987,409-428.
- [3] Whitted T, An improved illumination model for shaded display, *CACM* 23 (1980), No. 6.
- [4] 吴金通,自然光照物体的生成及计算机蒙太奇,浙江大学硕士论文,1988,5.
- [5] 李文娟,自然光源模型及计算机真实感物体的生成,中国科技大学硕士论文,1989,6.
- [6] [美]J D Foley and A V Dan 著,唐泽生、周嘉玉等译,交互式计算图形学基础,清华大学出版社,1986.

Generating 3D Realistic Images Scene With Ray—Tracing

Wu Jiánhua Sun Zhenshou

(Department of Radio and Electronics)

Abstract

A complex sky dome light source and a global illumination model are combined together with the ray-tracing to generate the realized scene of the objects which defined by the CSG tree. The experiment including objects shading, transparency and reflection are super-realistic. A object surrounding box method and its algorithm for ray-tracing to reduce CPU time are adopted.

Key words: generating 3D realized scene, ray-tracing, 3D display

西藏地壳模型及其化学成分初探

黎 彤 李 峰

(地球和空间科学系)

摘 要

西藏地壳是指青藏高原内中-新生代造山带的地壳。其面积 210 万 km^2 , 地壳平均厚度 63.5 km, 地壳体积 1.32 亿 km^3 , 地壳内的岩石平均密度 $2.775\text{g}/\text{cm}^3$, 地壳质量 3663 地克 ($=3.663 \times 10^{17}$ 吨)。

西藏地壳由五个槽壳构成。它们是松潘甘孜槽壳、三江槽壳、喀拉昆仑唐古拉槽壳, 冈底斯念青唐古拉槽壳和喜马拉雅槽壳。根据现有的地质学、地球物理学、地球化学和地理学资料, 本文概略地给出了西藏地壳模型及其化学成分。

关键词: 西藏地壳, 化学成分, 地壳模型, 元素丰度

中图法分类号: P591.1

青藏高原位于欧亚大陆和印度大陆交接处, 是研究现代板块构造的典型地区之一。本文讨论的西藏地壳仅指青藏高原内中-新生代造山带的地壳。这些年青的造山带, 其地势一般在海拔 6 km 以上, 面积达 210 万 km^2 , 地质条件复杂, 矿产资源丰富, 历来为中外地质界所瞩目。

研究西藏的地壳模型及其化学成分, 尤其是研究西藏地壳的元素丰度(西藏克拉克值), 不仅可以为西藏地区的资源开发和环境调查提供地壳化学背景资料, 还可以为进一步研究西藏岩石圈板块的化学成分和元素丰度奠定基础^[1]。为此, 本文仅据有限的地质学、地球物理学、地球化学和地理学资料, 大胆进行尝试, 藉此抛砖引玉, 交流学术思路, 促进这方面的深入研究。

1 大地构造单元和地壳结构层

1.1 大地构造单元的划分

西藏高原的大地构造位置属特提斯构造域,这点历来无任何异议。但是其大地构造单元,不同的学术观点有不同的划分法,并采用不同的术语。例如,多旋回学说以雅鲁藏布江深断裂为界,将本区划分为滇藏地槽褶皱区和喜马拉雅地槽褶皱区。滇藏地槽褶皱区包括四个褶皱系,即松潘-甘孜褶皱系、三江褶皱系、喀拉昆仑唐古拉褶皱系和冈底斯念青唐古拉褶皱系。喜马拉雅地槽褶皱区在我国境内只有喜马拉雅褶皱系。任纪舜等(1985)认为,滇藏地槽褶皱区是古亚洲大陆南缘的北特提斯地槽带的一部分,喜马拉雅地槽褶皱区则是冈瓦纳大陆北缘的南特提斯地槽带的一部分。而位于喜马拉雅地槽褶皱区内的雅鲁藏布江优地槽褶皱系(宽 20~40km),就是著名的雅鲁藏布江板块缝合线^[2]。又如,地洼学说将本区的大地构造单位划分为三个地槽区和两个地洼区。即巴颜喀拉地槽区、冈底斯地槽区和喜马拉雅地槽区,以及藏北地洼区和滇西地洼区。认为藏北和滇西的地质构造发展过程已经超越了地槽阶段和地台阶段,进入了地洼阶段^[3]。板块学说对本区的构造单元尚未提出新的术语,但是强调提出本区内存在三条主要的俯冲带和一条缝合线。即昆仑山晚古生代板块俯冲带,可可西里-金沙江早中生代板块俯冲带和藏北-滇西晚中生代板块俯冲带;以及雅鲁藏布江-印度河新生代板块缝合线^[4]。

为了便于利用原有资料,本文采用多旋回学说划分的五个褶皱系。其中三江褶皱系和喀拉昆仑唐古拉褶皱系均位于松潘-甘孜褶皱系和冈底斯念青唐古拉褶皱系之间。三江褶皱系位于东部,喀拉昆仑唐古拉褶皱系位于西部,其东南端超复于三江褶皱系之上^[2]。

从造山期来看,松潘-甘孜褶皱系和三江褶皱系属印支期,喀拉昆仑唐古拉褶皱系和冈底斯念青唐古拉褶皱系属燕山期,喜马拉雅褶皱系属晚始新世褶皱。因此,本区的褶皱系为北老南新。

1.2 地壳结构层的划分

参照地球物理探测成果^[5],西藏地壳一般可划分为四个结构层。从上到下为:

1. 沉积层。这是由地壳表层的沉积岩、岩浆岩和变质岩组成的结构层,以沉积岩广泛分布为特征。
2. 硅铝层 I。其化学成分相当于花岗闪长岩。平均波速 $V_p=6.34\text{km/s}$, $V_s=3.50\text{km/s}$ 。
3. 硅铝层 II。其化学成分相当于闪长岩。平均波速 $V_p=6.29\text{km/s}$, $V_s=3.47\text{km/s}$ 。
4. 硅镁层。其化学成分相当于玄武岩或辉长岩。其平均波速 $V_p=7.10\text{km/s}$, $V_s=3.93\text{km/s}$ 。

在上述结构层中,沉积层和硅铝层 I 和 II 构成上陆壳,硅镁层构成下陆壳。

各地槽褶皱系的地壳,简称槽壳。表 1 列出各槽壳中四个结构层的厚度和质量。质量以地克(Geogramme, Gg)为单位, ($1\text{Gg}=1\times 10^{20}\text{克}=1\times 10^{14}$)吨。

表1 西藏地壳各结构层的厚度和质量

槽 壳	沉积层		硅铝层 I		硅铝层 II		硅镁层	
	厚度 km	质量 Gg	km	Gg	km	Gg	Km	Gg
松潘-甘孜	3.6	50.8	16.2	250.6	29.8	488.0	13.5	228.6
三江	3.3	26.5	14.7	126.3	26.9	242.5	12.2	114.7
喀拉昆仑唐古拉	3.8	42.9	17.1	196.5	31.3	378.9	16.2	203.7
冈底斯念青唐古拉	6.3	80.3	16.2	218.5	26.8	371.2	16.2	239.0
喜马拉雅	6.0	36.5	17.6	114.7	17.0	113.8	19.5	139.0
平均	4.5		16.3		27.5		15.2	
合计		237.0		906.6		1594.4		925.0

表1说明西藏地壳的一个重要特点是具有巨厚的硅铝层,平均厚达43.8km。其硅铝层/硅镁层的质量比值平均为2.7。上陆壳/下陆壳的质量比值达到3.0。

2 各类岩石的分布

西藏地壳的研究范围,包括东昆仑南缘深断裂之南,龙门山深断裂和金沙江-红河深断裂之西,直至国境线的广大地区的地壳。地理上它以西藏自治区为主体,包括与其相邻的青海省南部,四川省西部和云南省西部,面积达210万km²,占全国陆地面积的1/5强。

各类岩石在本区范围内的分布,由于有些地区的地质调查程度较低,其出露面积的统计只是粗略估计。在210万km²范围内,火成岩出露的面积约16万km²,占全区面积的7.6%,其余92.4%的面积为沉积岩和变质岩所复盖。

2.1 火成岩

在火成岩出露的面积中,侵入岩约占96%,喷出岩约占4%。各类侵入岩在上述各褶皱系中的分布如表2所示。表2说明,花岗岩类的分布面积最广,其次是橄榄岩类。在冈底斯念青唐古拉褶皱系内的花岗岩类出露面积最大,其内发育有燕山期和喜马拉雅期的花岗岩带。超基性岩在三江褶皱系和喜马拉雅褶皱系内出露面积最广,均发育有蛇绿岩套。

表2 各类侵入岩的出露面积(km²)

褶皱系	花岗岩类	闪长岩类	辉长岩类	橄榄岩类	正长岩类	合计
松潘-甘孜	29660	2820	560	1590	500	35130
三江	21130	2250	720	2630	200	26930
喀拉昆仑唐古拉	9020	—	80	90	80	9270
冈底斯念青唐古拉	69850	410	70	900	—	71230
喜马拉雅	5620	45	410	2380	—	8455
合计	135280	5525	1840	7590	780	151015
面积(%)	89.6	3.7	1.2	5.0	0.5	100.4

火山喷出岩主要分布在喀拉昆仑唐古拉褶皱系和冈底斯念青唐古拉褶皱系,前者以中性火山岩为主,后者中性和基性火山岩均发育。三江褶皱系也有基性火山岩分布。

2.2 沉积岩和变质岩

沉积岩是本地区分布最广的岩类。沉积岩分为砂岩、页岩和碳酸盐岩三大基本岩类。一些浅变质岩也归属于相应的沉积岩类合并统计。例如:1)砂岩类,包括各种沉积碎屑岩、硅质岩和石英岩;2)页岩类,包括各种泥质岩、板岩和千枚岩;3)碳酸盐岩类,包括各种石灰岩、白云岩和大理岩。本地区的沉积层厚度平均为4.5km。其中各岩类所占的厚度比例为:砂岩37%,

页岩类 33%，碳酸盐岩类 30%。但是在各褶皱系中，岩类的分布比例各不相同。例如，松潘-甘孜和三江褶皱系，以砂岩类为主，喀拉昆仑唐古拉褶皱系以碳酸盐岩类为主，冈底斯念青唐古拉和喜马拉雅褶皱系则主要发育页岩类和碳酸盐岩类。

深变质岩包括各种片岩、片麻岩、变粒岩和混合岩。前三者主要分布在喀拉昆仑唐古拉褶皱系。在三江褶皱系内，混合岩出露面积达 11500km²，主要出露在澜沧江和哀牢山褶皱带。

3 地壳模型

3.1 基本参数

在 210 万 km² 的西藏高原地区内，其地壳的平均厚度为 63.5km，地壳体积为 132×10⁶ km³，岩石的平均密度为 2.775g/cm³，由此求得西藏地壳的质量为 3663 地克，即 3.663×10¹⁷ 吨，占我国陆壳总质量的 29.5%。表 3 列出各槽壳的质量分布。

表 3 西藏地壳的质量分布

槽壳	面积 ×10 ⁴ km ²	地壳厚度 km	地壳体积 ×10 ⁶ km ³	密度 g/cm ³	地壳质量	
					Gg	%
松潘-甘孜	58.7	63.1	36.8	2.766	1018	27.8
三江	32.5	57.1	18.4	2.772	510	13.9
喀拉昆仑唐古拉	43.4	68.4	29.5	2.786	822	22.5
冈底斯念青唐古拉	51.0	65.5	32.7	2.780	909	24.8
喜马拉雅	24.6	60.1	14.6	2.761	404	11.0
合计(平均)	210.2	(63.5)	132.0	(2.775)	3663	100.0

西藏地壳是我国厚度最大的地壳，也是世界上最厚的地壳。其平均厚度比全球陆壳还厚 27km，比我国陆壳厚 16.3km^[6]。在本地区中，喀拉昆仑唐古拉槽壳的厚度最大，三江槽壳的厚度最小，两者的平均厚度为 63.6km。

3.2 地壳模型

在西藏高原的中-新生代造山带中，有许多海拔高度达到 6 千米或 6 千米以上的山脉。如著名的喀拉昆仑山脉，唐古拉山脉，冈底斯山脉，念青唐古拉山脉，喜马拉雅山脉和横断山脉等等。其中有不少 8 千米以上的高峰。素有“世界屋脊”之称^[7]。

西藏地壳模型图(图 1)是根据上述大量统计资料编制的。图中各槽壳的平均高度和莫霍界面(Moho)的平均深度，均以海平面为准。

图 1a 为综合模型。该图将三江槽壳和喀拉昆仑唐古拉槽壳合并统计，以便于比较滇藏地槽褶皱区和喜马拉雅地槽褶皱区的地壳。图中表明，滇藏地槽褶皱区从整体来看，是一个慢陷区，而喜马拉雅地槽褶皱区则是一个慢隆区。

图 1b 是西藏东部的地壳模型，图中的 2a 只用三江槽壳作图。表示西藏东部相间出现两个慢陷区和两个慢隆区。松潘-甘孜槽壳和冈底斯念青唐古拉槽壳之下为慢陷区，而三江槽壳和喜马拉雅槽壳之下为慢隆区。

图 1c 是西藏西部的地壳模型，图中的 2b 只用喀拉昆仑唐古拉槽壳作图。却出现了与东部相反的情况，松潘-甘孜槽壳和冈底斯念青唐古拉槽壳之下，不再是慢陷区。唯一的慢陷区

是位于喀拉昆仑唐古拉槽壳之下。

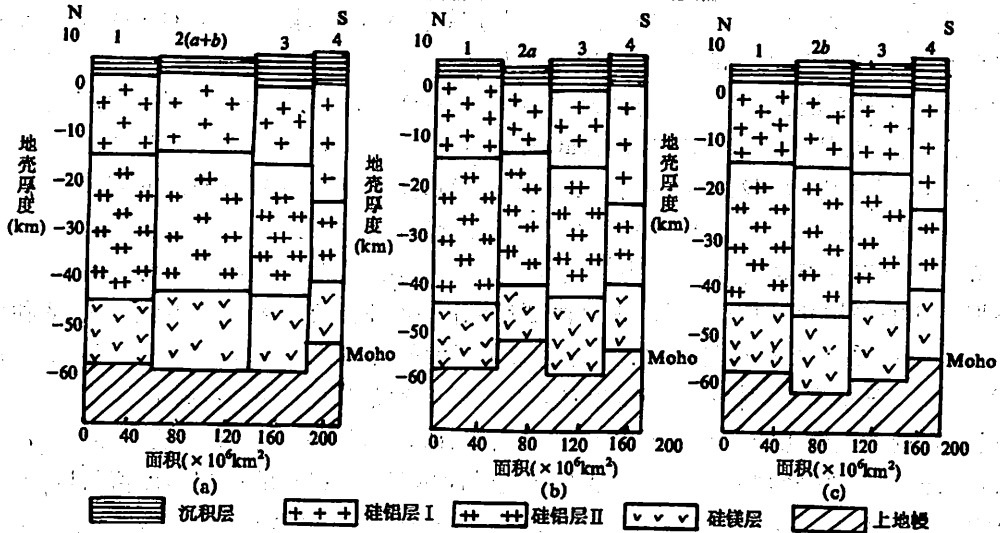


图 1 西藏地壳模型

(a)综合模型 (b)东部模型 (c)西部模型

由于图 1 是以一级构造单元为单位表示的地壳模型,它只是一种简化了的模型. 如果考虑到二级构造单元,则实际情况会变得复杂得多。

4 西藏地壳的化学成分

根据上述地壳模型及有关岩石化学资料,求得西藏地壳及其各槽壳的平均化学成分如表 4 所示. 表中附中国陆壳的平均化学成分,以便比较。

表 4 西藏地壳的平均化学成分 (质量%)

槽壳	松潘-甘孜	三江	喀拉昆仑 唐古拉	冈底斯念 青唐古拉	喜马拉雅	西藏地壳 平均*	中国陆壳 平均 ^[6]
SiO ₂	57.19	56.35	55.85	55.51	54.64	56.08	57.77
TiO ₂	1.20	1.19	1.25	1.26	1.42	1.25	1.10
Al ₂ O ₃	15.33	15.17	15.15	14.92	14.57	15.08	14.22
Fe ₂ O ₃	2.95	2.91	3.03	3.01	3.14	3.00	2.90
FeO	5.07	5.05	5.24	5.19	5.59	5.19	3.92
MnO	0.13	0.13	0.14	0.13	0.14	0.13	0.10
MgO	3.93	3.95	4.19	4.07	4.31	4.07	3.57
CaO	6.34	6.90	6.91	7.31	7.71	6.94	6.04
Na ₂ O	3.62	3.60	3.56	3.46	3.26	3.52	3.19
K ₂ O	2.05	2.02	1.99	2.03	2.00	2.02	2.82
P ₂ O ₅	0.26	0.26	0.27	0.27	0.27	0.27	0.44
CO ₂	0.57	1.11	1.03	1.46	1.57	1.08	2.02
H ₂ O ⁺	1.12	1.12	1.16	1.17	1.15	1.14	1.91
总和	99.76	99.76	99.77	99.79	99.77	99.97	100.00

* 平均值用质量加权平均法求出。

从表 4 可以看出,在西藏地壳内,无论是东部或西部,各槽壳的化学成分由北向南呈规律性变化。例如, SiO_2 、 Al_2O_3 、 Na_2O 等组分的含量呈递减趋势;相反地, TiO_2 、 CaO 、 CO_2 等组分的含量呈递增趋势。以西藏地壳的平均化学成分为背景,松潘-甘孜槽壳和三江槽壳为富 SiO_2 、 Al_2O_3 和 Na_2O 区;喀拉昆仑唐古拉槽壳为富 FeO 和 MgO 区;冈底斯念青唐古拉槽壳为富 CaO 和 CO_2 区;喜马拉雅槽壳为富 FeO 、 MgO 、 CaO 和 CO_2 区。

同中国陆壳对比,西藏地壳的化学成分具有 TiO_2 、 Al_2O_3 、 Fe_2O_3 、 FeO 、 MnO 、 MgO 、 CaO 和 Na_2O 等含量偏高, SiO_2 、 K_2O 、 P_2O_5 、 CO_2 和 H_2O^+ 等含量偏低的特征。

西藏地壳及其各槽壳的沉积层,其平均化学成分可参阅文献[8],此处不再赘述。

根据表 4 的平均化学成分,可以求出西藏地壳内 13 种主要元素的丰度值。这 13 种元素共占西藏地壳总质量的 99% 左右,其余许多微量元素的总和仅占 1% 左右。表 5 列出西藏地壳的质量丰度、原子丰度、体积丰度和相对丰度。这四种常用的丰度值,各有其不同的用途。例如,运用质量丰度值可求出西藏地壳内铁、锰、铝、磷、钛等可回收的矿产资源量;运用原子丰度值可求出西藏地壳的 ^{40}K 同位素丰度及其放射性热能;根据氧的体积丰度值可以判定,在西藏地区同样适用标准岩胞法(Barth 法)来计算其变质岩的化学成分变化;采用相对丰度值可以定量地对比不同自然体的丰度,表中的(a-b)栏就是西藏地壳和中国陆壳对比的结果。

表 5 西藏地壳的主要元素丰度

原子序数	化学元素	质量丰度 (质量%)	原子丰度 (原子%)	体积丰度 (离子体积%)	相对丰度 (Si 原子=100)		
					西藏地壳 (a)	中国陆壳 (b)	a-b
1	H	0.13	2.72	0.0016	14	22	-8
6	C	0.29	0.51	0.0023	2.6	4.8	-2.2
8	O	45.59	60.11	93.85	305	310	-5
11	Na	2.61	2.39	1.24	12	11	1
12	Mg	2.45	2.13	0.35	11	9.2	1.8
13	Al	7.98	6.17	0.47	32	29	3
14	Si	26.21	19.69	0.83	100	100	0
15	P	0.12	0.08	0.002	0.42	0.64	-0.22
19	K	1.68	0.91	1.22	2	6.2	-4.2
20	Ca	4.96	2.61	1.44	13	11	2
22	Ti	0.75	0.33	0.05	1.7	1.4	0.3
25	Mn	0.10	0.04	0.01	0.19	0.15	0.04
26	Fe	6.13	2.32	0.54	12	9.5	2.3

* 离子半径以 $\text{O}^{2-}=1.40\text{A}$ 为准。

最后值得指出的是,西藏地壳模型及其化学成分的研究刚刚起步,今后还有许多工作要做。例如,随着研究工作的进展,在基本资料积累和系统整理的基础上,可以求出更为精确的地壳模型和化学成分数据;在广泛开展区域地球化学研究的基础上,可以补充计算许多微量元素的西藏克拉克值,甚至可以编制出西藏地壳化学背景(或大地化学背景)与成矿规律图。此外,为了查明西藏地区的板块构造,开展西藏岩石圈的化学组成,化学结构和化学演化研究,也是一个不容忽视的重要方面。

参 考 文 献

- [1] 黎彤,地质学报,1985, No. 3, 219-227.
- [2] 任纪舜等,中国大地构造及其演化,科学出版社,北京,1985.
- [3] Chen Guoda, Tectonics of China, International Academic Publishers, Beijing, 1988.
- [4] 李春昱等,中国地质科学院院报,1980, No. 1.
- [5] 国家地震局,中国地壳上地幔地球物理探测成果,地震出版社,北京,1986.
- [6] 黎彤、倪守斌,地球和地壳的化学元素丰度,地质出版社,北京,1990.
- [7] 焦北辰等,中国自然地理图集,地图出版社,北京,1984.
- [8] 黎彤、李峰,地质与勘探,1991, No. 12, 1-7.

A Preliminary Research on the Model of Xizang(Tibet) Continental Crust and Its Chemical Composition

Li Tong Li Feng

(Department of Earth and Space Sciences)

Abstract

The Xizang crust is one belonging to the orogenic belts formed during Mesozoic-Cenozoic era in Xizang region. Its fundamental data are: Area $2.1 \times 10^6 \text{ km}^2$, average thickness 63.5 km, volume $1.32 \times 10^8 \text{ km}^3$, average density of rocks 2.775 g/cm^3 , mass 3663 Gg ($=3.663 \times 10^{17}$ metric tons).

The Xizang crust is composed of five fold orusts, i. e. the Songpan-Ganze fold crust, the Sanjiang fold crust, the Karakorum-Tanggula fold crust, the Gandise-Nyainqentanggula fold crust and Himalayan fold crust. Based on the data from the geological, geophysical, geochemical and geographical surves in this region, the model of the Xizang crust and its chemical composition are roughly presented in this paper.

Key words: Xizang(Tibet) crust, chemical composition, crustal model, abundance of chemical elements

复合材料等效导热系数的理论推算

陈则韶 钱 军 叶一火

(工程热物理系)

摘 要

藉最小热阻力法则和比等效导热系数相等法则,提出了用求复合材料的等效热阻及其限区来确定该复合材料的等效导热系数的方法,导出了推算复合材料等效导热系数的普遍式和一些具体式,给出了复合物中各组分的导热系数、容积比、相互组合的形状及取向等因素对等效导热系数影响的一些具体算值,将球堆积床的等效导热系数本文算值与已知实验数据作了比较,二者吻合良好.精度优于 Eucken 方程.

关键词:复合物、导热系数、推算

中图法分类号:O551.3

1 前言

大多数工程材料是混合物或复合材料,生产、科研常常需要人工合成各种性能的复合材料.复合材料的导热系数是表征材料热性能的主要参数,它与复合物中各组分的导热系数、容积比、各组分在混合物中的形状、排列及取向等因素有关^[1,2].根据大量实验结果建立的厄根(Eucken)方程^[3],反映了复合物中各组分的导热系数和容积比对复合物等效导热系数的影响,常被用于估算在宏观上被视为均性的混合物的等效导热系数.为了指导设计各向异性的复合材料和估算其等效导热系数,进一步弄清复合物中各组分的形状和排列对等效导热系数的影响是必要的.本文将根据最小热阻力法则和比等效导热系数相等法则,通过求复合材料的等效热阻及其限区来求该复合材料的等效导热系数.

2 理论法则

2.1 最小热阻力法则

法则:热量在物体内传递时,热流会沿热阻力最小的通道传递,或通道在流过定向热流量

时呈最小热阻力状态,相应态通道的总热阻即为最小热阻,也称等效热阻(R_e):

这规律就象水会沿水阻力最小的通道流动,电会沿电阻力最小的通道穿流一样,属于自然界的最小阻力法则,也称并联法则。

热阻力(ΔT_r)即为热流量 q 流过热阻为 R 的通道时所消耗的温降,其定义式为

$$\Delta T_r = R \cdot q \quad (1)$$

对于具有 n 个并联通道的二个点,不论每个通道的热阻如何,其每个通道的热流 q_i 与热阻 R_i 的乘积都相等,此时 n 个通道的热流总和最大, n 个通道的总热阻,即等效热阻为最小值。

据傅立叶定律,对于均质材料热阻 R 可写作:

$$R = L / (A \cdot \lambda) \quad (2)$$

式中 L 和 A 分别为热流通道长度和面积, λ 为通道材料的导热系数;对于复合材料,引入等效热阻(R_e)和等效导热系数(λ_e),据式(2)有:

$$R_e = L / (A \cdot \lambda_e) \quad (3)$$

因此,复合材料在指定热流向的等效导热系数 λ_e ,可以据上式通过先求该热流通道的等效热阻 R_e 获得。

2.2 比等效导热系数相等法则

为了给复合材料的总体与单元体搭桥,定义复合材料的比等效导热系数为:

$$\lambda_e = \lambda_c / \lambda \quad (4)$$

式中 λ_c 是作为参考值而约定的复合材料中连续相的导热系数。定义复合材料的比等效热阻为:

$$R_e = R_c / R_c \quad (5)$$

式中 R_c 为连续相的热阻。因为 $R_c = L / (A \cdot \lambda_c)$, $R_e = L / (A \cdot \lambda_e)$,所以有

$$\lambda_e = 1 / R_e \quad (6)$$

式(6)为复合材料的比等效导热系数相等法则的表达式。该法则具体表述为:当只考虑热传导时,不同复合材料只要比等效热阻 R_e 相等,它们的比等效导热系数就相等。据式(4)、(6)得推论:只要复合材料的单元体与总体有相等的比等效热阻,不论单元体的尺度大小,在只考虑热传导时,这种单元体与总体的等效导热系数相等。

由此推论得知,研究复合材料的等效导热系数,只要研究比等效热阻与之相等的单元体的等效导热系数即可。

3 复合材料等效导热系数的计算法和它的限区

据式(3)、(6)复合材料的等效导热系数的计算可归结为单元体的等效热阻的计算。而且可以把热阻比作电阻,借用电阻电路的一切计算原则和方法。应用该方法的关键是如何把复合体的单元体简化为相应的等效热阻网络图。原则上,可以用数值计算时常用的方法,把复合物单元体分割成数量足够多的等尺度的微元块,据式(2)算出微元块的平均热阻。微元块之间的连接抽象为微元块的热阻之间的连接,连接点可以选用热流通道中间面与通道横分层面的交点。微元块一般的分割法详细情况可参阅文献[4]。实用上,为了简化热阻网络图,通常把在热流纵向的全长上有相同热阻率的部分都归结为一个通道,或把在热流横向的全截面上有

相同热阻率的部分都归结为一层。例如图 1(a)的正方体复合块,即可用 X_1, X_2 和 Y_1, Y_2 4 个平面把单元体在 $x-y$ 截面上切成 9 块,用微元体热流通道中间面 Y'_1, Y'_2, Y' 与 X_1, X_2 及边界 X_0, X_3 交点作为微元块的连接点,则各微元块接点之间的热阻,在纵向上由前一个微元块提供,在横向上则为两连接相邻的微元体被包容的体积提供;若用带阴影的热阻表示分散相的热阻,则图 1(b)为该单元体的热阻网络图。设连续相的微元块热阻为 $R_2 = R_c$,分散相的为 $R_1 = R_d$,则图 1(b)中横向热阻 $R_s = R_c + (R_c + R_d)/4$ 。只要确定了热阻网络图中的各热阻,其等效热阻是可以计算出的。但是对于较复杂的网络图,即使用计算机计算也是相当费事的。

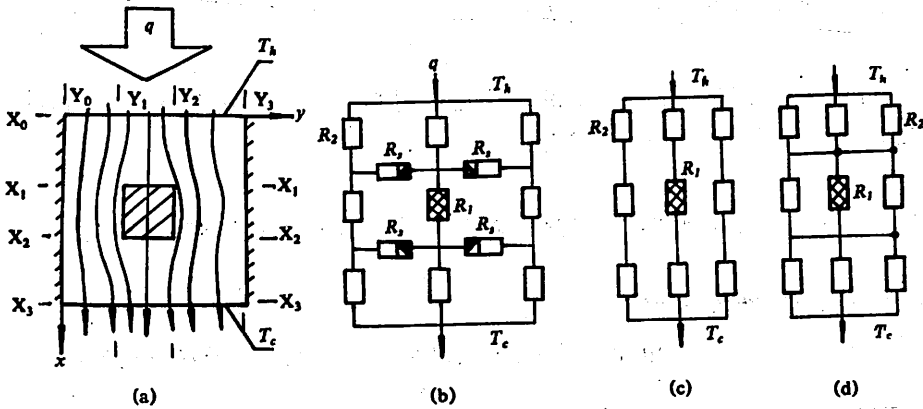


图 1 正方复合体单元体的模型及三种热网络图

根据数学的限区逼近法,可以对横向热阻作如下两种极端情况的假设:

假设 1: 横向热阻为无穷大;

假设 2: 横向热阻为无穷小;

据假设 1,简化的热阻网络图的等效热阻(R_{1-s})如图 1(c)那样是用先计算各通道的串联热阻,再计算各通道的并联热阻的方法获得的,其通用算式为:

$$\begin{aligned} \frac{1}{R_{1-s}} &= \sum_{i=1}^m \frac{1}{R_i} = \sum_{i=1}^m \left[1 / \sum_{j=1}^n (L_{ij} / A_i \lambda_j) \right] \\ &= \frac{1}{R_c} \sum_{i=1}^m \left[1 / \sum_{j=1}^n (l_{ij} / a_i \lambda_{jc}) \right] \quad (i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (8)$$

式中,下角标 i 为热流纵向通道的序号; j 为每通道内不同组分层的序号; L_{ij} 为第 i 通道内第 j 层的长度, l_{ij} 为其比长度($l_{ij} = L_{ij}/L$); A_i 为第 i 通道的横截面积, a_i 为其比面积($a_i = A_i/A$); λ_j 为第 i 通道内第 j 层成分的导热系数, λ_{jc} 为其比导热系数($\lambda_{jc} = \lambda_j/\lambda_c$). L, A 和 λ_c 分别为单元体长度、横截面积和连续相的导热系数. $R_c = L/(A \cdot \lambda_c)$.

通式(8)的应用,例如图 1(c)中,自左至右有三个热流通道,每通道自上而下分有三层,各微元块的比长 l_{ij} 均等于 $1/3$,并且 $a_i = 1/3$,则各微元块热阻分别为 $R_2 = R_c, R_1 = R_c \lambda_d/\lambda_c$,那么不难求得等效热阻。

据假设 2,简化的热阻网络图的等效热阻(R_{s-1})象图 1(d)那样是先计算各层的并联热阻,再计算整个通道各层的串联热阻的方法求得的,其通用算式为:

$$R_{s-1} = R_c \sum_{k=1}^p \left[1 / \sum_{j=1}^n (a_{kj} \lambda_{jc} / l_k) \right], \quad (k = 1, 2, \dots, p) \quad (9)$$

式中,下角标 k 为总通道的分层序号, j 为在第 k 层内并联的通道序号, a_{kj} 为第 k 层内第 j 通道的比截面积 ($a_{kj} = A_{kj}/A$), l_k 为第 k 层的比长度 ($l_k = L_k/L$).

为了寻求单元体 R_e 的更高精度的近似值,我们讨论图 2 中简单热网络的等效热阻. 图 2 中(a)、(b)、(c)三种情况的等效热阻的精确算式依次为以下三式:

$$R_{i-b} = (R_1 + R_3)(R_2 + R_4)/(R_1 + R_2 + R_3 + R_4)$$

$$R_{b-i} = [R_1 R_2 (R_3 + R_4) + R_3 R_4 (R_1 + R_2)] / [(R_1 + R_2)(R_3 + R_4)]$$

$$R_e = [R_1 R_2 (R_3 + R_4 + R_5) + R_1 R_4 R_5] / [(R_1 + R_2 + R_5)(R_3 + R_4 + R_5) - R_5^2]$$

$$+ \{ [R_2 R_5 (R_3 + R_1 + R_5) + R_4 R_5^2] / [(R_1 + R_2 + R_5)(R_3 + R_4 + R_5) - R_5^2] + R_4 \} \cdot R_3 / (R_3 + R_4 + R_5)$$

假定微元体各向同性,横向热阻 R_5 可用 R_e 替代, R_e 可用叠代法解得. 设 $R_1 = 1, R_2 = 2, R_3 = 4, R_4 = 3$, 算得 $R_{i-b} = 2.5, R_{b-i} = 2.381, R_e = 2.4450$. 当采用 R_{i-b} 与 R_{b-i} 的算术平均值当作 R_e 的近似值时, 仅比叠代法算出的精确值小 0.2%. 因此, 采用下式

$$R_e = (R_{i-b} + R_{b-i}) / 2 \tag{10}$$

作为 R_e 的较精确的近似计算式.

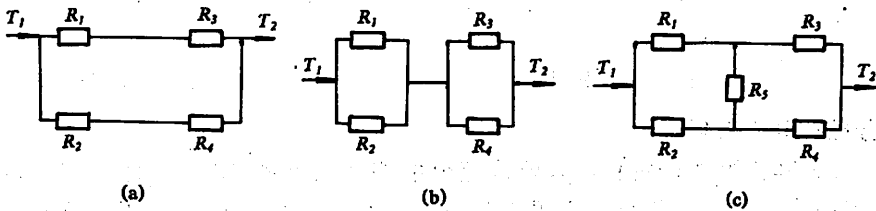


图 2 三种热阻网络图

据式(5)、式(6)和式(4), 对应于 R_{i-b} 的串-并联等效导热系数 λ_{i-b} 为

$$\lambda_{i-b} = \lambda_c \sum_{i=1}^m \left[1 / \sum_{j=1}^n (l_{ij} / a_{ij} \lambda_{jc}) \right] \tag{11}$$

对应于 R_{b-i} 的并-串联等效导热系数 λ_{b-i} 为

$$\lambda_{b-i} = \lambda_c / \sum_{i=1}^m \left[1 / \sum_{j=1}^n (a_{ij} \cdot \lambda_{jc} / l_k) \right] \tag{12}$$

复合体的等效导热系数也必介于 λ_{i-b} 与 λ_{b-i} 构成的限区内. 因为

$$\lambda_e = \lambda_c \cdot \lambda_e = \lambda_c / R_e = 2\lambda_c / [R_{i-b} + R_{b-i}]$$

$$= 2\lambda_c / \left[\frac{1}{\lambda_{i-b}} + \frac{1}{\lambda_{b-i}} \right]$$

所以

$$\lambda_e = 2\lambda_{i-b} \cdot \lambda_{b-i} / (\lambda_{i-b} + \lambda_{b-i}) \tag{13}$$

式(13)即为复合体等效导热系数的通用计算式.

4 若干类型复合材料的 λ_c 的具体方程

以下讨论的对象均为二组分复合材料. 属于组分 1 和组分 2 的各参数分别添加下角标 1 和 2 表示. v_1 ($v_1 = V_1/V$) 定义为组分 1 的体积与单元体的体积之比.

4.1 纯并联型

图 3(a)为该类型模型图、图 3(b)为其等效热阻网络图。热流与两成分的交界面平行。该复合体被视作有两个不同热阻的热流通道,组分 1 的通道比面积 $a_1 = v_1^{2/3}$, 其等效导热系数 λ_0 为

$$\lambda_0 = \lambda_2 [(\lambda_1/\lambda_2 - 1)v_1 + 1] \quad (14)$$

4.2 纯串联型

图 4(a)、(b)分别为其模型和热阻网络图。热流与两组分界面垂直。该复合体被视作一个通道分为两层,其等效导热系数 λ_0 为

$$\lambda_0 = \lambda_2 \{1/[(\lambda_2/\lambda_1 - 1)v_1 + 1]\} \quad (15)$$

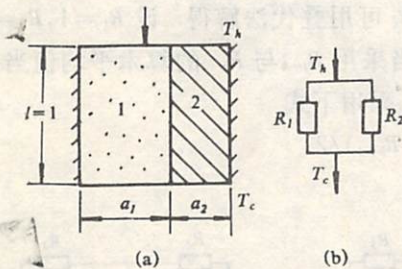


图 3 纯并联型

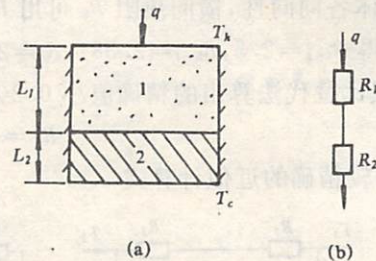


图 4 纯串联型

4.3 分散相为长方体

图 1(a)为其模型的一特例。只要假定分散相为长方体,图 1(a)即可作为该类型的模型图。此类复合体特点是两组分的交界面与单元体边界面对应平行,分散相在热流向的比长度为 l_1 ,垂直于热流向的比面积为 a_1 。只要 $l_1 < \sqrt{a_1}$,即可认为是扁方体模型。据式(11)导得

$$\lambda_{0-l} = \lambda_2 \left\{ \left[\frac{1}{(\lambda_2/\lambda_1 - 1)l_1 + 1} - 1 \right] \frac{v_1}{l_1} + 1 \right\} \quad (16)$$

据式(12)导得

$$\lambda_{0-l} = \lambda_2 / \{1 - l_1 + l_1/[\lambda_1/\lambda_2 - 1]a_1 + 1\} \quad (17)$$

当分散相为正方体时, $l_1 = v_1^{1/3}$, $a_1 = v_1^{2/3}$ 。

4.4 分散相为球形

分散相为球体,其比半径(r_0)为球半径 R_0 与单元体边长 L 之比。计算 λ_{0-s} 时,是先把热流通道分作二大系统:一个是在热流主向上只有连续相的简单通道;另一个是在热流主向上要遇到球分散相的通道,在该通道系统内,又必须根据热阻率相等的原则,以过球心的热流为轴,取许多微元环通道。例如,图 5(a)中,在球比半径 r_0 与轴线夹角 θ 处有 $d\theta$ 增量所形成的与轴线平行的圆筒环,该微环在热流横向的投影比面积为

$$da_{1\theta} = 2\pi r_0^2 \sin\theta \cos\theta d\theta$$

在微环通道内分散相的比长度 $l_{1\theta} = 2r_0 \cos\theta$,连续相的比长度为 $l_{2\theta} = (1 - 2r_0 \cos\theta)$,所以微环通道的比热阻 dR_{θ} 为

$$dR_{\theta} = \left(\frac{l_{1\theta} \lambda_2}{l_{2\theta} \lambda_1} + \frac{l_{2\theta}}{da_{1\theta}} \right) = \left[\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} - 1 \right) 2r_0 \cos\theta + 1 \right] / da_{1\theta}$$

含有分散相的总通道,即单元体的第 2 大通道的比热阻是夹角 θ 自 0 变至 $\pi/2$ 时,增量为 $d\theta$ 的许多微环通道的比热阻并联构成的,可以用并联热阻倒数求和法获得。将和号改为积分号,并

把只含单一连续相通道的比热阻 R_2 写出,

$$R_2 = 1/(1 - \pi r_0^2)$$

于是由通式(11)导得

$$\lambda_{e-i} = \lambda_2 \left[\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{2\pi r_0^2 \sin\theta \cos\theta d\theta}{(\lambda_2/\lambda_1) 2r_0 \cos\theta + 1} + (1 - \pi r_0^2) \right] \quad (18)$$

为简便算式令 $\lambda_p = (\lambda_2/\lambda_1 - 1)$, 积分上式, 得

$$\lambda_{e-i} = \lambda_2 \left\{ \pi r_0^2 \left[\frac{1}{\lambda_p} - \frac{\ln(2r_0\lambda_p + 1)}{2r_0\lambda_p^2} - 1 \right] + 1 \right\} \quad (19)$$

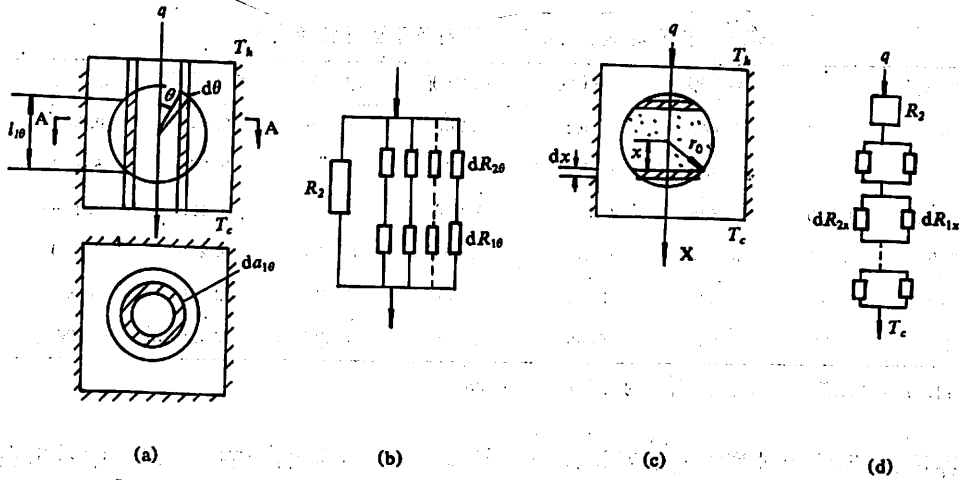


图 5 球的分散相分析图

计算 λ_{e-i} 时, 可把复合体分为二大层: 一层只含连续相, 厚 $(1 - 2r_0)$; 另一层含有分散相球。后者又必须继续分微层处理, 设在热流主向上过球心的热流线为 X 轴, 并以球心为原点, 在 x 处的 dx 厚的薄层的热阻是截面积为 $\pi(r_0^2 - x^2)$ 的球台截面的分散相的热阻与面积为 $1 - \pi(r_0^2 - x^2)$ 的连续相的热阻的并联热阻, 见图 5(c), (d)。因此复合体等效热阻是二大层的热阻串联结果。据式(12)得

$$\lambda_{e-i} = \lambda_2 / \left[1 - 2r_0 + 2 \int_0^{r_0} \frac{dx}{\pi(r_0^2 - x^2) \lambda_1/\lambda_2 + 1 - \pi(r_0^2 - x^2)} \right] \quad (20)$$

经过数学处理可得三种积分结果, 令

$$\lambda_q = (\lambda_1/\lambda_2 - 1), \quad w = r_0^2 + 1/\pi\lambda_q, \quad u = |w|^{1/2},$$

(A) $\lambda_1 < \lambda_2$, 并 $w < 0$:

$$\lambda_{e-i} = \lambda_2 / \left[1 - 2r_0 - \frac{2}{\lambda_q u} \operatorname{arctg} \frac{r_0}{u} \right] \quad (21)$$

(B) $\lambda_1 \leq \lambda_2$, 并 $w > 0$:

$$\lambda_{e-i} = \lambda_2 / \left[1 - 2r_0 - \frac{1}{\lambda_q u} \cdot \ln \frac{r_0 - u}{r_0 + u} \right] \quad (22)$$

(C) $\lambda_1 \geq \lambda_2$

$$\lambda_{e-i} = \lambda_2 / \left[1 - 2r_0 + \frac{1}{\lambda_q u} \ln \frac{u + r_0}{u - r_0} \right] \quad (23)$$

当 $\lambda_1 = \lambda_2$ 时, $\lambda_{0-t} = \lambda_2$, 以上算式只适用于 $v_1 \leq \pi/6$ 的情况.

本节仅给出上述四种类型复合物的等效导热系数的具体算式, 对于其它类型复合物, 通式也成立.

5 结果与讨论

表 1 给出了用上文的算式计算的若干算例的 λ_c 值, 直观地体现了复合材料中各组分的导

表 1 不同 λ_1/λ_2 、 v_1 、形状和排列的复合材料的 λ_c 值

λ_1/λ_2	v_1	并联型	长方体形	正方形形	球形	扁方体形	串联型
0.1	0.250	0.775	0.695	0.700	0.656	0.643	0.308
	0.500	0.550	0.505	0.468	0.415	0.350	0.182
	0.750	0.325	0.325	0.270	—	0.129	0.129
0.01	0.500	0.505	0.451	0.403	0.313	0.249	0.019
10	0.50	5.50	3.38	2.80	3.29	2.12	1.82
100	0.50	50.5	5.60	3.84	7.39	2.44	1.98

注: 长方体的长度 $l_1 = 1.1v_1^{1/3}$ 扁方体形的长度 $l_1 = 0.78835v_1^{1/3}$

热系数、容积比、形状和排列方向等对该复合材料等效导热系数的影响. 从表 1 中看出在每组分导热系数相差很大时 (λ_1/λ_2 很大) 排列方向变得十分敏感, 例如, $\lambda_1/\lambda_2 = 100, v_1 = 0.5$ 时, 并联型与串联型导热系数就要相差 25 倍; 另外, 即使复合物中组分和组分的容积不变, 而把组分的相互位置互换一下, 即连续相与分散相互调, 则结果也绝然不同, 例如, $v_1 = 0.5, \lambda_1/\lambda_2 = 10$ 或 $\lambda'_1/\lambda'_2 = 0.1$, 以正方形形为例, 前者的 $\lambda_c = 2.8\lambda_2$, 后者的 $\lambda'_c = 0.468\lambda'_2$, 而实际有 $\lambda'_2 = \lambda_1 = 10\lambda_2$, 所以 $\lambda'_c/\lambda_c = 1.67$. 这些现象的揭示对于复合材料的设计有重要的意义.

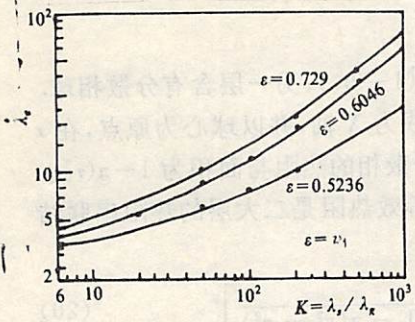


图 6 球堆积床 λ_c 的数值计算结果

λ_s —— 固相的导热系数
 λ_g —— 气相的导热系数
 ϵ —— 固相的堆积率

图 6 示出根据通式(11)、(12)、(13)算出的几种堆积率 (ϵ) 不同的球堆积床的比等效导热系数, $\epsilon = v_1$.

表 2 示出了几种球堆积床等效导热系数的实验值 ($\lambda_{c,exp}$) 和本文算值 ($\lambda_{c,cal}$) 及 Eucken 方程的计算值 (λ^*) 的比较. 表中 $\lambda_g, \lambda_s, \epsilon$ 是球堆积床的实验参数, λ_c 是据相应实验参数由图 6 用插值法查出, $\lambda_{c,cal} = \lambda_c \cdot \lambda_g$.

由表 2 可看出, 本文算法的精度高于厄根 (Eucken) 方程, 前者平均相对偏差为 -0.02 , 后者为 -0.65 , 相对偏差 δ 定义为

$$\delta = (\lambda_{c,cal} - \lambda_{c,exp}) / \lambda_{c,cal}$$

这初步从实验的角度肯定了本文所提出的理论和算法的可靠性.

表2 若干球堆积床的 λ_{exp} 和 λ_{cal} 、 λ^* 的比较

堆积床	λ_s (W/m·k)	λ_p (W/m·k)	ϵ	λ_{exp} (W/m·k)	λ_0	λ_{cal} (W/m·k)	λ^*
玻璃珠—空气	1.09	0.029	0.60	0.180[6]	6.8	0.197	0.142
玻璃珠—氢气	1.09	0.149	0.60	0.460[6]	3.7	0.540	0.492
玻璃珠—氮气	1.09	0.016	0.60	0.234[7]	9.4	0.150	0.080
胶质玻璃珠—空气	0.19	0.026	0.60	0.095[8]	3.7	0.096	0.086
钢珠—氢气	26.2	0.190	0.63	2.34[9]	15.5	2.94	1.15

参 考 文 献

- [1] 奚同庚, 复合材料导热因子的理论分析及其导热性的实验研究和预测, 工程热物理学报, 4(1982), NO. 2, 153—157.
- [2] 王补宣、王仁, 含湿建筑材料的导热系数, 工程热物理学报, 4(1982), NO. 2, 147—152.
- [3] 奚同庚等, 固体的热物性及其测试方法, 中国计量出版社, 北京, 1987, 10—12.
- [4] 陈则韶、钱军, 关于非金属固体复合材料等效导热系数的理论推算, 传热传质学术论文集, 庐山 1989.
- [5] 陈则韶, 叶一火, 堆积床等效导热系数的一种高精度推算式, 第八届工程热物理年会论文集, 1992.
- [6] Versschoor H, and Schuit G C A, Heat Transfer to Fluids Flowing through a Bed of Granular Solids, *Appl. Scientist. Res. A*₂(1950), 97.
- [7] Prins J A, and Schram J G, Heat Conduction in Powders in Various Gaseous Atmospheres at low Pressure, *Physica's Grav.*, 16(1950), No. 4, 379.
- [8] Luikov A V, shashkov A G, Vasiliev L L and Fraiman Yu E, Thermal Conductivity of Porous Systems, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1986, No. 11, 117—140.
- [9] Schumann T E W, and Voss V, Heat Flow through Granulated Materials, *Fuel Sci Pract.*, 13 (1934), 249.

Predicting Theory of Effective Thermal Conductivity of Complex Material

Chen Zeshao Qian Jun Ye Yihuo

(Department of Engineering Thermophisic)

Abstract

Based on both of the minimum heat resistance rule and the effective thermal conductivity rate rule, a general method of calculation the effective thermal conductivity of complex material is proposed, and a general and several specific formulas are established. Some effective thermal conductivities of the complex material, of which the such data as the influential parameters, the conductivity of the components, their rate of volumes, the shapes and the direction of their interface are given. The calculative and experimental data of some ball accumulation beds are compared, are found to be in good agreement. The calculation accuracy by the method presented in this paper is better than by Eucken's equation.

key words: thermal conductivity, predication, complex material

超高分子量聚乙烯凝胶结晶膜的 结晶形态 X 射线衍射研究*

周贵恩 朱清仁 高建峰 戚嵘嵘 洪昆仑

(中国科学技术大学结构分析开放实验室)

叶朝辉

(中国科学院武汉物理所)

摘 要

对由准稀溶液速冷凝胶化结晶方法制备的超高分子量聚乙烯(UHMWPE)膜,应用广角及小角 X 射线衍射进行了研究,证明所形成的膜是片晶-分子链折叠的层积状结构。片晶折叠链的分子链方向(即 C 轴方向)垂直于膜面,在片晶间无规排列的分子链平行膜面,具有较强的“排列”取向,片晶-无规排列链形成的大点阵间距为 109 Å,片晶间的无规排列链沿垂直分子链方向的统计平均间距约为 4.6 Å,分子链数约为 4~5。这一结果在超拉伸过程中,有利于从片晶-折叠分子链到完全伸直链的转变,从而可获得超高拉伸比($\lambda > 200$)。

关键词: 超高分子量聚乙烯,凝胶化结晶, X 射线衍射,片晶-无序折叠分子链的层积状结构。

中图法分类号: O631.13

1 引言

通过拉伸高取向,使通用高分子量聚乙烯接近其理论极限力学物性,成为具有高强度、高模量的材料,已为近年来热点研究课题。成功的例子有高压挤出^[1,2],局部拉伸^[3,4],凝胶拉伸^[5],层积状单晶超拉伸^[6]等。也有报道从 PE 以外的高分子出发制作出高模量、高强度材料

1991年12月30日收到。

*国家自然科学基金资助课题,28970198

的方法,但从链结构考虑,由于无氢键存在的 PE 容易形成束状链,且重复单元的长度短,结晶度高,易于达到它的固有极限物性值,此外,UHMWPE ($\bar{M}_w > 10^6$) 更具特异性^[7]. 所以目前许多研究者主要集中在以 UHMWPE 为中心的超拉伸的研究.

我们曾用 UHMWPE 在准稀溶液条件下形成的凝胶/结晶膜,在接近熔点的拉伸温度下获得了高拉伸比($\lambda=150$)的高模量、高强度膜.同时还用新近出现的固体高分辨核磁共振方法研究了拉伸取向前后膜的相结构及超拉伸性^[8]. 对膜的相结构研究表明:它主要由正交及单斜晶系结晶相、界面相所组成,几乎不存在无定形橡胶相.

本文旨在报道用 X 射线衍射方法,对在选定的浓度条件下所形成的 UHMWPE 凝胶/结晶膜中 PE 分子链的排列、结晶形态等超分子结构的观测结果,这些结果有助于进一步理解 UHMWPE 膜超分子结构同其可拉伸性之间的关系.

2 实验方法

2.1 样品制备

超高分子量聚乙烯用上海化工研究院三厂生产的 5-26 甲($\bar{M}_w = 4.95 \times 10^6$),和日本产 Million240($\bar{M}_w = 1.9 \times 10^6$),为比较还使用了低分子量 PE,系辽阳石油化工公司生产的 R5055 ($\bar{M}_w \sim 2 \times 10^4$). 上述原料于 138°C 的油浴中,以 0.4%wt/V 溶于十氢化萘,同时加入 0.1%(重量百分比)的抗氧化剂(2,6-di-tert-butyl-p-cresol),通氮保护,充分搅拌 45~60 分钟,待全部溶解后注入一由冰水包围冷却的铝制平底钵内急速冷却,在两星期期间缓慢风干除去溶剂,然后用甲醇浸泡 24 小时并洗净. 在 50°C 真空干燥 48 小时,得到约 100 μ 厚度的膜.

2.2 X 射线衍射

2.2.1 广角 X 射线衍射

使用理学电机产 D/Max-rA 旋转阳极 X 射线衍射仪,石墨单色器结合脉冲高度分析器, $\text{Cu}_K\alpha$ 线. 对称反射时,膜面与样品架表面平行,狭缝系统,DS(发散狭缝)为 1°,SS(散射狭缝)为 1°,RS(接收狭缝)为 0.15mm. 记录到的衍射面与样品面平行. 对称透射时,在扫描过程中膜面始终处于入射光和衍射光角平分位置,狭缝 DS 为 (1/6)°,SS 为 1°,RS 为 0.15mm. 记录到的衍射面与膜面垂直. 两种几何布置如图 1(b)、图 2(b).

2.2.2 小角 X 射线衍射

用广角 X 射线衍射仪,对称反射几何布置,DS 狭缝用 (1/2)°,SS 狭缝用 0.05mm 的 RS 代替,RS 用 0.05mm. 步进连续扫描,起始角(2 θ)可作到 0.25°.

2.2.3 平板照相

用丹东仪器厂产的 JF-1 型 X 射线晶体分析仪,理学电机公司的劳厄相机. Cu 靶,点焦点, Ni 滤光, 0.5mm 针孔准直管准直. 样品到底片距离 40mm.

3 结果与讨论

图 1(a)是 Million 240 UHMWPE 凝胶干燥膜的对称反射广角 X 射线衍射图,它给出平行于样品膜面的各衍射面的衍射强度分布. 图 2(a)是对称透射广角 X 射线衍射图,它给出的是

与膜面垂直的各衍射面的衍射强度分布. 对两图比较后发现: 在对称透射图 2(a) 中, (110, 200, ……) 衍射很强. 与对称反射相比较, 在对称反射条件下明显出现的“非晶”散射弥散峰在对称透射衍射中消失. 上述两种不同几何布置的衍射结果, 说明 (hko) 面与样品面趋于垂直, 折叠链片晶面与膜面平行, 即结晶轴 C 与膜面垂直取向. 这与文献[9]指出的小角散射照相在子午线上出现高次散射极大, 表示片晶沿膜面平行方向堆砌的结果一致. 图 1(a) 中较宽的衍射峰是样品中“非晶”部分的衍射. 比较图 1 及 2 后, 容易看出它是无规链沿与膜面平行的方向排列. 进一步用布喇格公式, 由图 1(a) 中“非晶”衍射峰的极大位置 ($2\theta = 19.3^\circ$), 得到这种

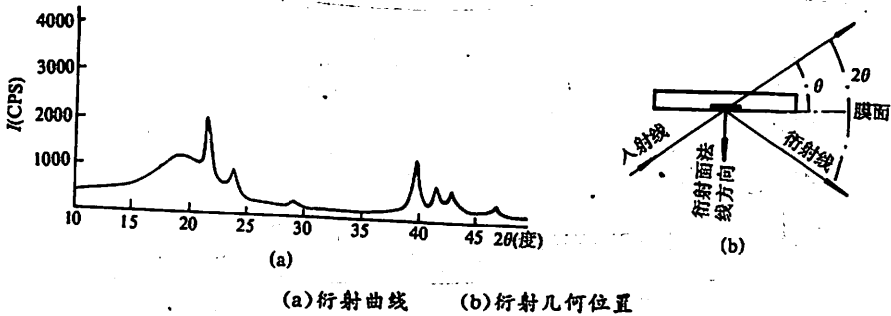


图 1 对称反射的衍射

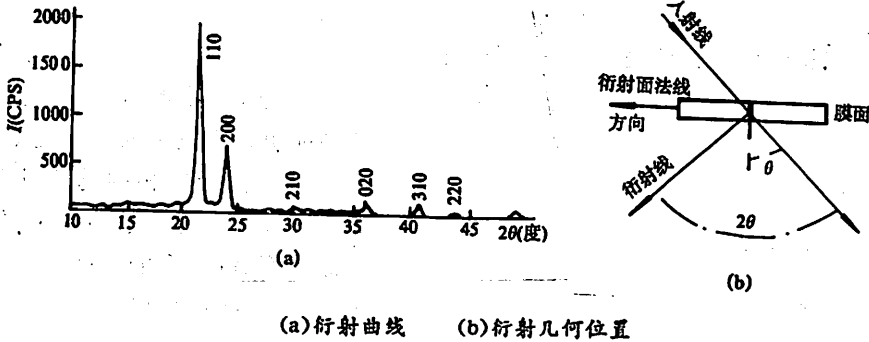


图 2 对称透射的衍射

无规则排列链的统计平均间距是 4.6 \AA . 这个间距是无规排列分子链横截面上的链间统计平均间距. 由于只有在对称反射时才有“非晶”衍射强度, 因此, 片晶间的这种无规排列链与无规链团所形成的非晶是不同的, 它虽是无规排列, 但还是具有一定程度的有序. 在文献[8]中, 由固体高分辨 NMR 的实验结果计算得到作为非晶成分的界面相厚度为 21 \AA , 该结果与 Flory 最近所计算出界面相厚度的理论值 20 \AA 极为一致^[10]. 因此有理由认为片晶间的无规折叠链相应于上述界面相. 由平均链间距 (4.5 \AA) 及界面相厚度, 可估算出片晶间排列的无规分子链数平均为 4~5. 因为目前有研究结果认为决定 UHMWPE 超高拉伸性的重要因素之一是片晶间或分子链束间所存在的链缠结浓度^[2,7], 预期该浓度与上述链平均数相关.

图 3(a) 是用广角衍射仪慢扫描得到的小角 X 射线衍射曲线; 图 3(b) 是正常扫描速度得到的同一试样的小角 X 射线衍射图. 由小角 X 射线衍射结果, 经过误差校正, 明确得到片晶所形成的大点阵周期, 即片晶层交替排列的相邻间距为 110 \AA . 这里的大点阵如前所述, 它垂直于膜面. 这与由固体高分辨 ^{13}C 核磁共振所测出的结晶相中片晶厚度值相符合^[8].

对于 5-26 甲的试样,也获得与上述相同的结果. 低分子量 R5055PE 在相同制备条件下,几乎不能形成具有一定强度的膜,但它的长周期仅增加少许,关于这一点可以作进一步研究. 此外,通过对膜的正反面作小角 X 射线衍射还发现,靠近底板一面大点阵形成得好,折叠分子

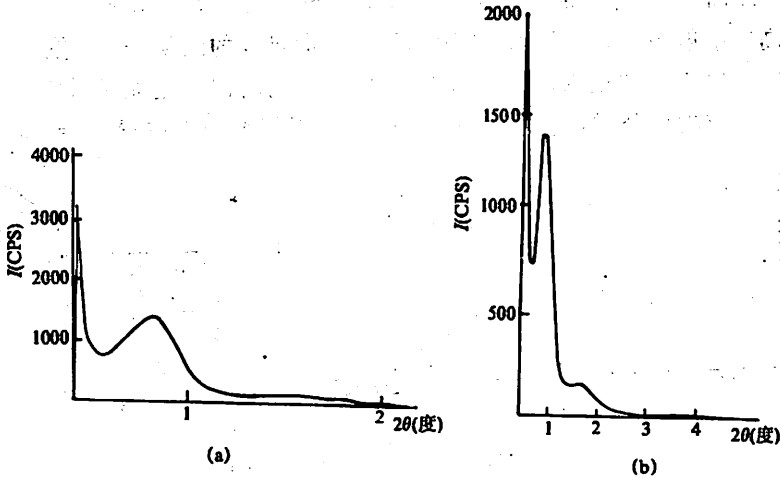


图 3 小角 X 射线衍射曲线

(a)慢扫描 (b)常规扫描

链形成的片晶层积规整,远离底板的另一面规整性较差,这与 Keller^[11]在比较玻璃和云母底板上析出的 PE 晶形时,发现在玻璃板上的结晶更趋于完善的有趣现象相似. 这一现象类似于气相的基质外延附生结晶. 预料若使用合适的基板,综合兼顾结晶速率,链构型的松弛率或分子链的扩散速度,我们可以控制或制作出多种形态的结晶.

聚乙烯结晶形态有两种:其一为伸展链型,由分子链完全伸展而形成的分子间结晶的束状晶;另一为折叠链型. 前者多为低分子量或熔融态结晶形成,后者由稀溶液结晶产生分子内晶化,最终形成板状片晶. 本文中使用的超高分子量 PE 已远高于形成片晶的临界分子量,同时利用了速冷方法制膜,都使结晶过程中折叠链型(图 4)优势生成. 结果表明,即使在分子量高于数百万的情况下,仍保持以 100Å 链段长为单位折叠. 还应注意,这一晶化过程与通常情况不同,所形成的片晶平面均取与膜面平行的方向堆砌,这一机制可能是片状微晶的各表面自由能相互间存在差异所引起的. 关于这一点的讨论在另文报告.

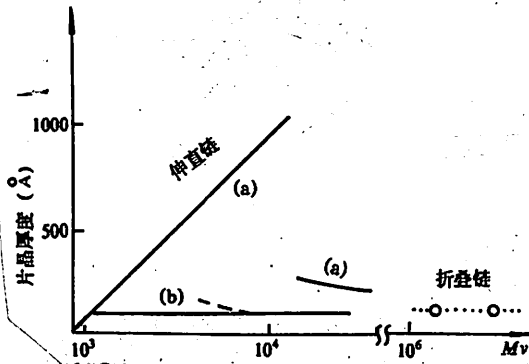


图 4 PE 结晶片晶厚度与分子量 M_v 的关系

(a)熔融结晶;(b)溶液结晶;
实线为 Keller 的结果^[12],虚线为河合的结果^[13],点线及·为本工作的结果

综上所述,可以绘出如图 5 所示的 UHMWPE 凝胶干燥膜理想情况下的结构堆砌模型. 平板照相进一步验证了上述模型. 图 6(a)是垂直膜面的平板照相,图 6(b)是平行膜面的

平板照相进一步验证了上述模型. 图 6(a)是垂直膜面的平板照相,图 6(b)是平行膜面的

平板照相。(a)图是均匀强度的同心圆,(b)图中(110)和(200)等(hko)型衍射在子午方向产生强衍射弧段,前者说明在膜面内不同方向没有择优取向,后者说明在垂直于膜面法线方向存在着取向分布。从衍射花样还可以看出,模型是理想情况,实际的 UHMWPE 凝胶膜中链取向是有一定分布的。

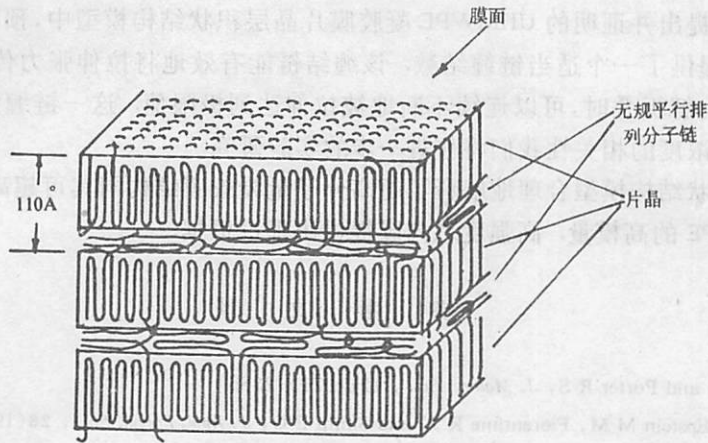


图5 片晶积层结构

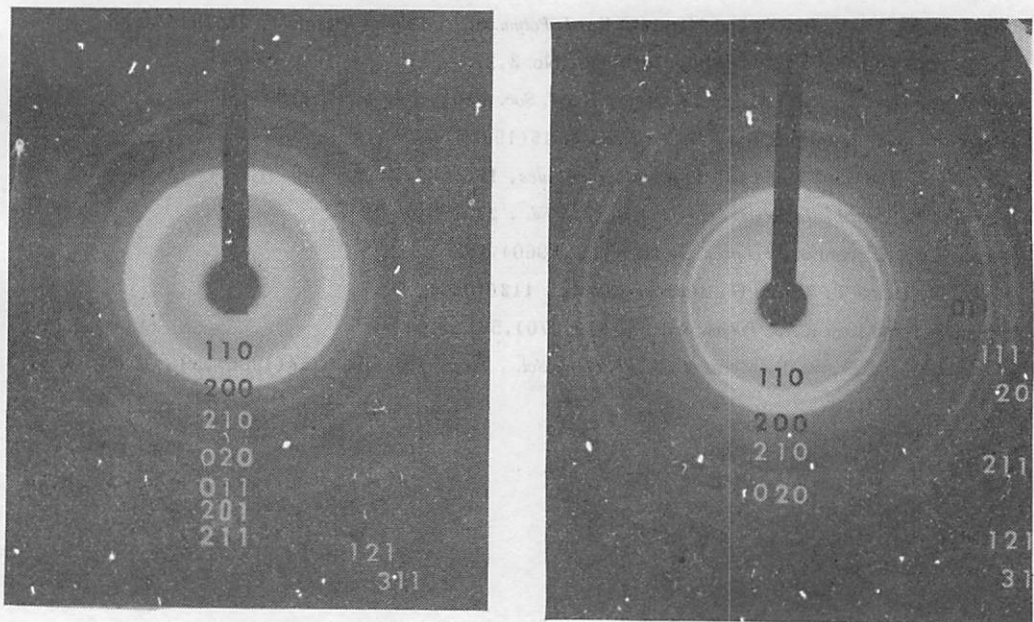


图6 平板照相

(a)垂直膜面入射 (b)平行膜面入射

4 结语

本实验结果表明由准稀溶液速冷凝胶化结晶方法制备的超分子量聚乙烯干燥膜,具有

类单晶^[14]的层积状片晶结构。X 射线衍射结果证明:组成片晶的折叠分子链 C 轴垂直于膜面,在片晶间的无规排列分子链与膜面平行,并且有较强的取向排布。这一超分子结构模型,在拉伸取向过程中,有利于从片晶——折叠分子链转变为完全的伸直链。这一过程类似于 PE 单晶的拉伸取向^[15],可最终获得接近 PE C—C 键理想极限力学强度的高分子材料。

另外,本文提出并证明的 UHMWPE 凝胶膜片晶层积状结构模型中,预期界面层的无规排列分子链可能提供了一个适当链缠结数。该缠结链能有效地将拉伸张力传递到片晶折叠链,使片晶经拉伸力解折叠时,可以连续不断地被拉伸达到极限值。这一链缠结数可能与初始成膜浓度有关,与浓度的相关性我们将作进一步的实验研究。

因此,层积状结构模型合理地解释了超高分子量凝胶膜结构同其可超高取向性间的关系,为获得 UHMWPE 的高模量、高强度取向膜提供出理论根据。

参 考 文 献

- [1] Perkin W G and Porter R S, *J. Mater. Sci.*, **12**(1977), 2355.
- [2] Bigg D M, Epstein M M, Fiorentino R J, and Smith E G, *J. Appl. Polym. Sci.*, **26**(1981), 395.
- [3] Takahiro M, Okui N, and Sakai T, *Sen-i Gakkaishi*, **40**(1984), T-311.
- [4] Okui N, Takahiro M, Kikuchi H, Umemoto S, and Sakai T, *Int. Polym. Proc.*
- [5] Smith P, and Lemstra P J, *J. Mater. Sci.*, **15**(1980), 505.
- [6] Furuhashi K, Yokoyama T, and Miyasaka K, *J. Polym. Sci., Polym. Phys. Ed.*, **22**(1984), 133.
- [7] 朱清仁、何平笙,《工程塑料应用》, **20**(1992), No. 3, 27.
- [8] Zhu Q R, Horii F, Tsrji M, and Kitamaru R, *J. Soc. Rhology, Japan*, **17**(1989), 35.
- [9] Matsuo M, and Manley R S J, *Macromolecules*, **15**(1982), 985.
- [10] Flory P J, Yoon D Y, and Dill K A, *Macromolecules*, **17**(1984), 862—868.
- [11] Martines-Salazar J, *J. Polym. Sci., Polym. Phys. Ed.*, **22**(1984), 1085.
- [12] Keller A, A O'connor, *Polymer [London]*, **1**(1960), 163.
- [13] Kawai T, Hama T, Maeda H, *Makromol. Chem.*, **113**(1968), 282.
- [14] Ishikawa I and Kaji K, *J. Polym. Sci.*, **C. 31**(1970), 57.
- [15] Furuhashi K, Tokokawa T, Miyasaka K, *J. Polym. Sci., Polym. Phys. Ed.*, **24**(1986), 59.

X-ray Diffraction Study for Morphology of Ultra-high Molecular Weight Polyethylene Produced by Gelation/Crystallization

Zhou Guien, Zhu Qingren Gao Jianfeng Qi Rongrong Hong kunlun

(Structure Research Laboratory, University of Science and Technology of China)

Ye Zhaohui

(Wuhan Institute of Physics, Academia Sinica, Wuhan)

Abstract

Ultra-high molecular weight polyethylene(UHMWPE) gel films are prepared by gelation/crystallization from a semidilute solution. The obtained samples are investigated with wide and small angle X-ray diffraction. The results confirm that the gel films are composed of alternating mat textures of large crystal lamellae whose flat faces parallel the film surface and the random folded-chains that intervene between the two lamellae, that the chain c-axes in the lamellae are oriented perpendicular to the film surface, while the random folded-chains are directed parallel to the film surface. The long spacing is approximated as 110Å, the interchain distance along the direction normal to the chains in random folded-chain layer average 4.6Å. Therefore, between the two lamellae there are 4 or 5 for the random folded-chains. The feature is thought to be favorable to transformation of the lamellae into completed microfibrillar structure, to assure ultradrawing up to high draw ratios.

Key word: ultra-high molecular weight polyethylene, gelation/crystallization, X-ray diffraction, crystal lamellae/random folded-chain structure

A Generalization of Roth Inequality on Distribution

Sun Heng Xu Yanzhi

(Department of Mathematics)

Abstract

The present paper develops an inequality of Roth to the general case.

Let $\Omega \subset R^n, f \in C^m(\Omega)$, and P_1, \dots, P_N be N points contained in Ω . Let $S(x^1, \dots, x^m)$ denote the number of points contained in $(-\infty, x^1) \times \dots \times (-\infty, x^m)$. $\Delta(t) := \{x \in \Omega \mid \left| \frac{\partial^m f(x)}{\partial x^1 \dots \partial x^m} \right| \geq t\}$, $\rho(x, \partial\Delta(t))$ denote the distance between x and the edge of $\Delta(t)$. Then $\int_{\Omega} (S(x) - f(x))^2 dv \geq c(m) (\log N)^{m-1} N^{-2} \int_0^{\infty} t \int_{\Delta(t)} \rho(x, \partial\Delta(t))^m dx dt$, where $c(m) > 0$ is a constant and depends on m only.

Key words: disribution, irregularities, inequality

AMS Classifications(1991): 11K

1 Introduction

Roth^[1] proved the following theorem:

Let N be a large integer, and P_1, P_2, \dots, P_N be points, not necessarily distinct, in the square $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$, for any point (u, v) in this square, let $S(u, v)$ denote the number of points in the rectangle $0 \leq x < u, 0 \leq y < v$. Then

$$\int_0^1 \int_0^1 (S(x, y) - Nxy)^2 dx dy > c \log N \tag{1}$$

where c is a positive absolute constant.

Suppose domain $\Omega \subset R^m, f \in C^m(\Omega), x = (x^1, \dots, x^m) \in R^m$. Let $dv = dx^1 dx^2 \dots dx^m, \rho(x, \partial\Omega)$ be the distance from x to the boundary of Ω . Suppose $P_1, \dots, P_N \in R^m$, and $S(x) = S(x^1, \dots, x^m)$ is the number of points in $[0, x^1] \times \dots \times [0, x^m]$. In this paper we will generalize (1) to the following theorem:

Theorem Let $\Omega \subset R^m, f \in C^m(\Omega), P_1, P_2, \dots, P_N$ be N points in Ω . $\Delta(t) = \{x \in \Omega \mid |\partial^t f(x) / \partial x^1 \dots \partial x^m| \geq t\}$ for $t \geq 0$. Then

$$\int_{\Omega} [S(x) - f(x)]^2 dv \geq c(m) (\log N)^{m-1} N^{-2} \int_0^{\infty} (t \int_{\Delta(t)} \rho(x, \partial\Delta(t))^m dv) dt \quad (2)$$

where $c(m)$ is a positive constant related to m only.

2 The Case in $[0, 1]^m$

Firstly, we introduce some notations.

Let $P_i = X_i = (X_i^1, X_i^2, \dots, X_i^m)$ be points in $[0, 1]^m$, not necessarily distinct, $i = 1, 2, \dots, N$ where N is a large integer. Any $x \in [0, 1)$ has the unique representation with the base 2 as the form

$$x = x_1/2 + x_2/2^2 + x_3/2^3 + \dots, x_i = 0 \text{ or } 1$$

Let $x_i(x)$ denote the value of x_i in the representation of x . Let $\psi_r(x) = (-1)^{x_r}$ for $r = 1, 2, \dots$

Let $n > 2$ be an integer to be chosen later and $R_n = \{r = (r_1, \dots, r_n) \in N^n \mid r_1 + r_2 + \dots + r_n = n\}$.

We define a function $F_r(x)$ related to $\{P_i, i \leq N\}$ as follows.

Firstly, if there is at least one i for which

$$\left. \begin{aligned} x_1(X_i^1) = x_1(x^1), \dots, x_{r_1-1}(X_i^1) = x_{r_1-1}(x^1) \\ \dots \dots \dots \\ x_1(X_i^n) = x_1(x^n), \dots, x_{r_n-1}(X_i^n) = x_{r_n-1}(x^n) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

take $F_r(x) = 0$.

Secondly, if there is no such i , we take $F_r(x) = \psi_1(x^1) \psi_2(x^2) \dots \psi_{r_n}(x^n)$.

We now show that

$$\int F_r(x) dx^t = 0, \text{ for } k = 1, 2, \dots, m \quad (4)$$

provided the limits of integration are integral multiples of 2^{-r_i+1} .

This is because that the distinction into two cases in the definition of $F_r(x)$ for fixed $(x^1, x^2, \dots, x^{t-1}, x^{t+1}, \dots, x^t)$ depends only on $x_1(x^t), \dots, x_{r_1-1}(x^t)$, and the integral over x^t gives equal and opposite contributions with $x_{r_1}(x^t) = 0$ and $x_{r_1}(x^t) = 1$.

Denote $F(x) = \sum_{r \in R_n} F_r(x)$.

In the following of the section, we prove six lemmas.

Lemma 1 If $f(x) \in C^n(R^m)$ and $\partial^n f / \partial x^1 \partial x^2 \dots \partial x^m \geq 0$, then $\int_{[0,1]^m} f(x) F_r(x) dv \geq 0$.

Proof By induction on dimension m .

When $m = 1$, for any fixed k , if there is an $X_i \in [k/2^{r-1}, (k+1)/2^{r-1})$, then $F_r(x) = 0$. Other-

wise, $F_r(x) = -1$ or $+1$ corresponding to $x \in [k/2^{r-1}, (2k+1)/2^r]$ or $[(2k+1)/2^r, (k+1)/2^{r-1}]$. Hence, since $\partial f/\partial x \geq 0$, $\int_{k/2^{r-1}}^{(k+1)/2^{r-1}} f(x) F_r(x) dx = \left(\int_{(2k+1)/2^r}^{(k+1)/2^{r-1}} - \int_{k/2^{r-1}}^{(2k+1)/2^r} \right) f(x) dx \geq 0$

Therefore, the summation over $k = \{0, 1, \dots, 2^{r-1} - 1\}$ yields $\int_0^1 f(x) F_r(x) dx \geq 0$.

Now suppose that the proposition is true with m replaced by $m-1$.

Denote $dv^1 = dx^1 dx^2 \dots dx^{m-1}$. $x' = (x^1, \dots, x^{m-1})$. It suffices to prove that, for each $k \in \{0, 1, \dots, 2^{r_m-1}\}$, $\int_{k2^{1-r_m}}^{(k+1)2^{1-r_m}} dx^m \int_{[0,1]^{m-1}} f(x) F_r(x) dv^1 \geq 0$.

There is no loss generality in assuming that among $P_i (i=1, 2, \dots, N)$, the points satisfying $x_i^m \in [k2^{1-r_m}, (k+1)2^{1-r_m}]$ are $P_1, P_2, \dots, P_M (M \leq N)$. Let $P_i = (X_i^1, X_i^2, \dots, X_i^{m-1})$, $(i=1, 2, \dots, M)$ and let F_r' be the corresponding function related to $\{P_i, i=1, 2, \dots, M\}$. It is obvious that

$$F_r(x) = \psi_{r_m}(x^m) F_r'(x')$$

$$\begin{aligned} \text{Hence} \quad & \int_{k2^{1-r_m}}^{(k+1)2^{1-r_m}} dx^m \int_{[0,1]^{m-1}} f(x) F_r(x) dv^1 \\ & = \int_{k2^{1-r_m}}^{(k+1)2^{1-r_m}} dx^m \int_{[0,1]^{m-1}} [f(x', x^m + 2^{-r_m}) - f(x', x^m)] F_r'(x') dv^1 \end{aligned}$$

Since $\partial^m f/\partial x^1 \dots \partial x^m \geq 0$, $\partial^{m-1} f(x', x^m)/\partial x^1 \dots \partial x^{m-1}$ is a nondecreasing function of x^m , then

$$\frac{\partial^{m-1}}{\partial x^1 \dots \partial x^{m-1}} [f(x', x^m + 2^{-r_m}) - f(x')] \geq 0$$

By the inductive hypothesis on $m-1$, we have

$$\int_{[0,1]^{m-1}} [f(x', x^m + 2^{-r_m}) - f(x', x^m)] F_r'(x') dv^1 \geq 0$$

Therefore, lemma 1 follows.

Lemma 2 $\int_{[0,1]^m} x^1 x^2 \dots x^m F_r(x) dv \geq 2^{-2^i} (2^{2^m} - N)$, where $r \in R_m$.

Proof $\int_{[0,1]^m} x^1 x^2 \dots x^m F_r(x) dv$

$$\begin{aligned} & = \sum_{\substack{1 \leq k_i \leq 2^{i-1} \\ i=1, 2, \dots, m}} \int_{(k_1-1)2^{1-r_1}}^{k_1 2^{1-r_1}} \dots \int_{(k_m-1)2^{1-r_m}}^{k_m 2^{1-r_m}} x^1 \dots x^m F_r(x) dv \\ & = \sum_{\substack{r_j(\xi^j)=0,1 \\ 1 \leq j \leq m, 1 \leq i \leq r_j-1}} \int_{-2^{-r_1}}^{2^{-r_1}} \dots \int_{-2^{-r_m}}^{2^{-r_m}} (\xi^1 + x^1) \dots (\xi^m + x^m) \cdot F_r(\xi^1 + x^1, \dots, \xi^m + x^m) dv \end{aligned}$$

$$\left(\text{where } \xi^j = (2k_j - 1)2^{-r_j} = \frac{x_1(\xi^j)}{2} + \dots + \frac{x_{r_m-1}(\xi^j)}{2^{r_m-1}} + \frac{1}{2^{r_m}} \right)$$

$$= \sum^* \int_{-2^{-r_1}}^{2^{-r_1}} \dots \int_{-2^{-r_m}}^{2^{-r_m}} (\xi^1 + x^1) \dots (\xi^m + x^m) \text{sgn} x^1 \dots \text{sgn} x^m dv$$

where the summation is over all those sets of values of $x_i(\xi^j) = 0, 1 (1 \leq j \leq m, 1 \leq i \leq r_j - 1)$ for which (3) does not hold for any $k \in \{1, 2, \dots, N\}$.

Now $\int_{-a}^a (\xi + x) \text{sgn} x dx = \int_{-a}^a x \text{sgn} x dx = a^2$. Hence, the above expression is $\sum^* 2^{-2^i}$.

The total number of possibilities for $x_i(\xi^j) (1 \leq j \leq m, 1 \leq i \leq r_j - 1)$ is 2^{r_m} , and there can be at most N of those for which (3) holds for some $k \in \{1, 2, \dots, N\}$. Hence the total number of terms in

\sum^* is at least $2^{n-m} - N$, whence the result $\int_{[0,1]^n} x^1 \cdots x^m F_r(x) dv \geq (2^{n-m} - N)2^{-2n}$. (We shall eventually choose n so that $2^{n-m} > N$.)

Lemma 3 Let $c(n) = |R_n|$ be the number of solutions of $r_1 + r_2 + \cdots + r_m = n$ ($r_i \geq 1, i = 1, \dots, m$) and $A = \min_{[0,1]^n} |\mathcal{D}^m f / \partial x^1 \cdots \partial x^m|$, then $|\int_{[0,1]^n} f(x) F_r(x) dv| \geq 2^{-2n} (2^{n-m} - N) c(n) A$.

Proof: It is easy to understand that we may suppose $\mathcal{D}^m f / \partial x^1 \cdots \partial x^m \geq 0$ in $[0, 1]^n$. The proofs in other cases are similar or trivial.

Let $R(x) = f(x) - Ax^1 \cdots x^m$, then $\mathcal{D}^m R / \partial x^1 \cdots \partial x^m = \mathcal{D}^m f / \partial x^1 \cdots \partial x^m - A \geq 0$. By lemma 1, $\int_{[0,1]^n} R(x) F_r(x) dv \geq 0$. By lemma 2, $\int_{[0,1]^n} Ax^1 \cdots x^m F_r(x) dv \geq 2^{-2n} (2^{n-m} - N) A$. Therefore

$$\begin{aligned} & \int_{[0,1]^n} f(x) F_r(x) dv \\ &= \sum_{r \in R_n} \left[\int_{[0,1]^n} Ax^1 \cdots x^m F_r(x) dv + \int_{[0,1]^n} R(x) F_r(x) dv \right] \\ &\geq \sum_{r \in R_n} 2^{-2n} (2^{n-m} - N) A = 2^{-2n} (2^{n-m} - N) c(n) A \end{aligned}$$

Lemma 4 $\int_{[0,1]^n} F^2(x) dv \leq c(n)$.

Proof $\int_{[0,1]^n} F(x^2) dv = \sum_{r \in R_n} \int_{[0,1]^n} F_r^2(x) dv + \sum_{\substack{s \neq t \\ s, t \in R_n}} \int_{[0,1]^n} F_s(x) F_t(x) dv$

Since $|F_r(x)| \leq 1$, the first expression on the right is at most $c(n)$. We shall prove the second expression is 0 by proving if $s \neq t$, then

$$\int_{[0,1]^n} F_s(x) F_t(x) dv = 0 \tag{5}$$

Without loss of generality, suppose $s_m < t_m$. Hence $F_s(x)$ is constant when $x^m \in [(k-1)2^{1-t_m}, k2^{1-t_m}]$. Then by (4).

$$\int_{(k-1)2^{1-t_m}}^{k2^{1-t_m}} F_s(x) F_r(x) dx^m = 0, \int_0^1 F_s(t) F_t(x) dx^m = 0$$

Immediately (5) holds, and lemma 4 follows.

Lemma 5 For $i = 1, 2, \dots, N$, $\int_{x_i^1}^1 \int_{x_i^2}^1 \cdots \int_{x_i^m}^1 F(x) dv = 0$.

Proof It suffices to prove that $\int_{x_i^1}^1 \cdots \int_{x_i^m}^1 F_r(x) dv = 0$.

Let X^k be the least multiple of 2^{1-r_k} which is no less than X_i^k ($k = 1, 2, \dots, m$).

$$\int_{x_i^1}^1 \cdots \int_{x_i^m}^1 F_r(x) dv = \left(\int_{x_i^1}^{X^1} + \int_{X^1}^1 \right) \cdots \left(\int_{x_i^m}^{X^m} + \int_{X^m}^1 \right) F_r(x) dv$$

Thus, we split the integral into 2^m terms.

By the definition of $F_r(x)$, $\int_{x_i^1}^{X^1} \cdots \int_{x_i^m}^{X^m} F_r(x) dv = 0$, since $F_r(x) = 0$ and the other $2^m - 1$ terms are also 0 by (4). Then lemma 5 follows.

Lemma 6 For $f(x) \in C^n(R^n)$,

$$\int_{[0,1]^n} [S(x) - f(x)]^2 dv \geq c_1 N^{-2} \log^{n-1} N \min_{[0,1]^n} \left(\frac{\partial^n f}{\partial x^1 \dots \partial x^n} \right)^2.$$

(in this paper, $c_1, c_2 \dots$ are used to denote the constants depending only on m)

Proof By lemma 5,

$$\begin{aligned} \int_{[0,1]^n} S(x) \cdot F(x) dv &= \int_{[0,1]^n} F(x) \left(\sum_{\substack{1 \leq i \leq n \\ x_i' \leq x_i \\ 1 \leq j \leq n}} 1 \right) dv \\ &= \sum_{i=1}^N \int_{x_i^1}^1 \dots \int_{x_i^n}^1 F(x) dv = 0 \end{aligned}$$

By lemma 3, $\left| \int_{[0,1]^n} [f(x) - S(x)] F(x) dv \right| \geq 2^{-2n} (2^{n-1} - N) c(n) A$

By Schwartz Inequality and lemma 4, we have

$$\int_{[0,1]^n} [f(x) - S(x)]^2 dv \geq c(n) [2^{-2n} (2^{n-1} - N) A]^2 \tag{6}$$

Choose n so that $2^{n+2} N \geq 2^{2n} > 2^{n+1} N$. For $c(n) \sim n^{n-1} / (m-1)!$, when N is large enough, we have $c(n) \geq (\log N)^{n-1} / m!$. Thus lemma 6 follows after a short calculation of (6).

3 General Case

Lemma 7 Let $\alpha + [0, \tau]^n \subset \Omega$. Then

$$\int_{\alpha + [0, \tau]^n} [S(x) - f(x)]^2 dv \geq c_2 (\log N)^{n-1} N^{-2} \tau^{2n} \min_{\alpha + [0, \tau]^n} \left(\frac{\partial^n f}{\partial x^1 \dots \partial x^n} \right)^2$$

Proof Let $\alpha = (\alpha^1, \alpha^2, \dots, \alpha^n)$,

$$P_i^* = (Y_i^1, \dots, Y_i^n) = \frac{1}{\tau} (X_i^1 - \alpha^1, \dots, X_i^n - \alpha^n), \quad 1 \leq i \leq N$$

$$P_i^{**} = (\max(0, Y_i^1), \dots, \max(0, Y_i^n)), \quad 1 \leq i \leq N$$

$$P_{N+1}^* = P_{N+2}^* = \dots = P_M^* = 0, \quad M = N + [e^n] + 1.$$

$S^*(x^1, \dots, x^n)$ and $S^{**}(x^1, \dots, x^n)$ denote the number of points $\{P_i^*, i=1, \dots, N\}$ and $\{P_i^{**}, i=1, \dots, M\}$ in $(-\infty, x^1) \times \dots \times (-\infty, x^n)$ respectively. Then $S^*(x) = S(x \cdot \tau + \alpha)$ and for $x \in [0, 1]^n, S^{**}(x) = S^*(x) + M - N$.

By lemma 6, we have

$$\begin{aligned} &\int_{\alpha + [0, \tau]^n} [S(x) - f(x)]^2 dv \\ &= \tau^n \int_{[0,1]^n} [S^*(y) - f(\tau y + \alpha)]^2 dy^1 \dots dy^n \\ &= \tau^n \int_{[0,1]^n} [S^{**}(y) - f(\tau y + \alpha) + M - N]^2 dy^1 \dots dy^n \\ &\geq \tau^n c_1 (\log N_1)^{n-1} N_1^{-2} \left[\min_{[0,1]^n} \frac{\partial^n f}{\partial y^1 \dots \partial y^n} f(\tau y + \alpha) \right]^2 \\ &= c_1 (\log N_1)^{n-1} N_1^{-2} \tau^{2n} \left(\min_{\alpha + [0, \tau]^n} \frac{\partial^n f}{\partial x^1 \dots \partial x^n} \right)^2 \end{aligned}$$

where N_1 is the number of points $P_i^{**} (1 \leq i \leq M)$ in $[0, 1]^n$.

Then $N_1 \leq M = N + [e^n] + 1$. It is easy to see that $N_1 \geq e^n$, $(\log N_1)^{n-1} N_1^{-2} \geq (\log M)^{n-1} M^{-2} \geq \frac{1}{2} (\log N)^{n-1} N^{-2}$ (N is large). We obtain lemma 7 from (7).

Lemma 8 For any $A, 0 \leq A \leq \sup \left| \frac{\partial^n f}{\partial x^1 \dots \partial x^n} \right|$,

$$\int_{\Omega} [S(x) - f(x)]^2 dv \geq c_3 (\log N)^{n-1} N^{-2} A^2 \int_{\Delta(A)} \rho(x, \partial \Delta(A))^n dv$$

Proof Consider the close set $\Delta_\varepsilon(A)$ in $\Delta(A)$, where $\Delta_\varepsilon(A) = \{x \in \Delta(A) \mid \rho(x, \partial \Delta(A)) \geq \varepsilon\}$. All the cubes mentioned in the following are m -dimensional and with the edges parallel to coordinate axes respectively.

For any $x \in \Delta_\varepsilon(A)$, construct an m -dimensional open cube $U(x)$ with center x satisfying

$$U(x) \subset \Delta(A), U(x) \cap \partial \Delta_\varepsilon(A) \neq \emptyset.$$

Then $\Delta_\varepsilon(A) \subset \bigcup_{x \in \Delta_\varepsilon(A)} U(x)$, thus there exist finite cubes U_1, U_2, \dots, U_l covering $\Delta_\varepsilon(A)$.

Let U_1 be the biggest in them. $U_i (i \geq 2)$ be the biggest in those without intersection with $U_j (j < i)$. Suppose we finally get $l \leq n$ nonintersecting cubes $U_i (i = 1, \dots, l)$. Let r_i be the length of the edge of U_i, V_i be the cube with the same center as U_i and the length $3r_i$ of edges ($i \leq l$). Then it is easy to see for any $U_j (j = 1, \dots, n)$, there is some $i \leq l, U_j \subset V_i$. So

$$\Delta_\varepsilon(A) \subset \bigcup_{i=1}^l V_i, V_i \cap \partial \Delta_\varepsilon(A) \neq \emptyset.$$

Thus for any $x \in V_i, \rho(x, \partial \Delta_\varepsilon(A)) \leq 3\sqrt{m} r_i$. Then

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta_\varepsilon(A) \cap V_i} \rho(x, \partial \Delta_\varepsilon(A))^n dv \\ & \leq (3\sqrt{m} r_i)^n \int_{\Delta_\varepsilon(A) \cap V_i} dv \leq 9^n m^{\frac{n}{2}} r_i^{2n} \end{aligned}$$

Since $\Delta_\varepsilon(A) = \bigcup_{i=1}^l (\Delta_\varepsilon(A) \cap V_i)$, we have

$$\int_{\Delta_\varepsilon(A)} \rho^n dv \leq \sum_{i=1}^l \int_{\Delta_\varepsilon(A) \cap V_i} \rho(x, \partial \Delta_\varepsilon(A))^n dv \leq 9^n m^{\frac{n}{2}} \sum_{i=1}^l r_i^{2n} \tag{8}$$

By lemma 7, since $U_i \subset \Delta(A)$,

$$\begin{aligned} & \int_{U_i} (S(x) - f(x))^2 dv \\ & \geq c_2 (\log N)^{n-1} N^{-2} r_i^{2n} \min \left(\frac{\partial^n f}{\partial x^1 \dots \partial x^n} \right)^2 \geq \frac{c_2}{4} (\log N)^{n-1} N^{-2} r_i^{2n} A^2 \end{aligned}$$

Since $\bigcup_{i=1}^l U_i \subset \Omega$ and $U_i \cap U_j = \emptyset$ for $i \neq j, i, j \leq l$, by (8)

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (S - f)^2 dv &= \sum_{i=1}^l \int_{U_i} (S - f)^2 dv \\ &\geq \frac{c_2}{4} (\log N)^{n-1} N^{-2} A^2 \sum_{i=1}^l r_i^{2n} \\ &\geq \frac{c_2}{4} (\log N)^{n-1} N^{-2} A^2 9^{-n} m^{-\frac{n}{2}} \int_{\Delta_\varepsilon(A)} \rho^n(x, \partial \Delta_\varepsilon(A)) dv \end{aligned}$$

$$= c_2(\log N)^{m-1}N^{-2}A^2 \int_{\Delta(A)} \rho(x, \partial\Delta(A))^m dv$$

Lemma 8 follows by $\varepsilon \rightarrow 0$.

Proof of the theorem Suppose $M = \sup_{\Omega} |\partial^n f / \partial x^1 \dots \partial x^n|$ is finite, and let Ω be a bounded domain.

Let $\varepsilon = M/n, (n=1, 2, \dots)$.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (S - f)^2 dv &= \sum_{k=0}^{n-1} \int_{\Delta(k\varepsilon) - \Delta((k+1)\varepsilon)} (S - f)^2 dv \\ &\geq c_3(\log N)^{m-1}N^{-2} \sum_{k=0}^{n-1} (k\varepsilon)^2 \int_{\Delta(k\varepsilon) - \Delta((k+1)\varepsilon)} \rho^m(x, \partial\Delta(k\varepsilon)) dv \\ &= c_3(\log N)^{m-1}N^{-2} \left[\sum_{k=0}^{n-1} (k\varepsilon)^2 \int_{\Delta(k\varepsilon)} - \sum_{k=0}^{n-1} (k\varepsilon)^2 \int_{\Delta((k+1)\varepsilon)} \right] \rho^m dv \\ &= c_3(\log N)^{m-1}N^{-2} \sum_{k=1}^{n-1} (2k-1)\varepsilon^2 \int_{\Delta(k\varepsilon)} \rho^m dv \\ &\geq c_3(\log N)^{m-1}N^{-2} \sum_{k=1}^{n-1} (k\varepsilon) \int_{\Delta(k\varepsilon)} \rho^m dv \end{aligned} \tag{9}$$

Let $n \rightarrow \infty$ and $\varepsilon \rightarrow 0$, we obtain the theorem by the definition of integration.

For the general case. Let

$$\Omega_n = \{x \in \Omega \mid \|x\| \leq n, \rho(x, \partial\Omega) \geq \frac{1}{n}\}$$

Thus Ω_n is a bounded close set, so f is bounded in Ω_n . By the above proof,

$$\int_{\Omega_n} (S - f)^2 dv \geq c_3(\log N)^m N^{-2} \int_0^\infty (t \int_{\Delta(t) \cap \Omega_n} \rho(x, \partial\Delta(t)) dv) dt$$

The two sides of the above inequality are nondecreasing of n . The theorem follows by $n \rightarrow \infty$.

In the theorem, let $\Omega = [0, 1]^m, f(x) = N_{x^1 \dots x^m}$, By (2)

$$\int_{[0,1]^m} [S(x^1, \dots, x^m) - N_{x^1 \dots x^m}]^2 dx^1 \dots dx^m \geq c(m) (\log N)^{m-1}$$

The above inequality is the direct generalization of (1).

Thanks are due to Professor Lu Minggao for instruction and help.

Reference

[1] Roth K F, On Irregularities of Distribution, *Mathematika*, 1 (1954), 73-79.

关于 Roth 分布不等式的一个推广

孙 衡 徐延志

(数学系)

摘 要

本文推广了 Roth 的关于分布不均匀性的一个不等式到很一般的情况.

设 Ω 为 R^m 中一区域, $f \in C^m(\Omega)$. $P_1 \cdots P_N$ 为 Ω 内 N 个点. 记 $S(x^1, \dots, x^m)$ 为在 $(-\infty, x^1) \times \cdots \times (-\infty, x^m)$ 内的点数. 记 $\Lambda(t) = \{x \in \Omega \mid |\partial^m f(x) / \partial x^1 \cdots \partial x^m| \geq t\}$. $\rho(x, \partial\Lambda(t))$ 为 x 到 $\Lambda(t)$ 的边界距离, 则

$$\int_{\Omega} [S(x) - f(x)]^2 dv \geq c(m) (\log N)^{m-1} N^{-2} \int_0^{\infty} (t \int_{\Lambda(t)} \rho(x, \partial\Lambda(t))^m dv) dt.$$

关键词: 分布, 奇异性, 不均匀性

中图法分类号: O156.4

表自然数为两个无平方因子数的和*

余红兵

王巧林

(中国科学技术大学)

(南京师范大学)

摘 要

设 n 为自然数, \mathcal{A} 为全体无平方因子数的集合, $T(n)$ 是满足 $n=a+b$ 的数对 (a, b) 的个数, 其中 $a, b \in \mathcal{A}$. 本文证明了

$$T(n) = cn\rho(n) + O(n^{2/3}\log n)$$

这里 $c = \prod_p \left(1 - \frac{2}{p^2}\right)$, $\rho(n) = \prod_{p^2|n} \left(1 + \frac{1}{p^2 - 2}\right)$, p 为素数.

关键词: 无平方因子数, 渐近公式, 误差改进

中图法分类号: O156.1

AMS Classification(1991): 11D85

1 引言及基本引理的证明

设 n 为自然数, \mathcal{A} 为无平方因子数的集合, $T(n)$ 是满足 $n=a+b$ 的数对 (a, b) 的个数, 其中 $a, b \in \mathcal{A}$. 1931年, Estermann^[1]证明了

$$T(n) = cn\rho(n) + O(n^{2/3+\varepsilon})$$

这里 ε 为任意正数, $c = \prod_p \left(1 - \frac{2}{p^2}\right)$, $\rho(n) = \prod_{p^2|n} \left(1 + \frac{1}{p^2 - 2}\right)$

1963年, Cohen^[2]将上述结果改进为

$$T(n) = cn\rho(n) + O(n^{2/3}\log^2 n)$$

本文将证明下面的结果.

1992年元月4日收到.

* 国家自然科学基金资助课题

定理 设 $n \geq 2$ 为自然数, $T(n), c, \rho(n)$ 的意义同上所述, 则我们有

$$T(n) = cn\rho(n) + O(n^{2/3}\log n)$$

定理的证明是初等的, 这依赖于下面的基本引理.

基本引理 记 $Q_{m,r}(n) = \sum_{\substack{a \in \mathcal{A} \\ a \equiv r \pmod{m} \\ a < n}} 1$, 则

$$Q_{m,r}(n) = \begin{cases} 0, & \text{如 } (m, r) \notin \mathcal{A} \\ \frac{n}{m} \prod_{p|m} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) \prod_{\substack{p|m \\ p \nmid r}} \left(1 - \frac{1}{p}\right) + O(n^{1-\alpha}m^{-1-\beta}(m_1, r)) + O(n^\alpha m^\beta) + \\ + O(n^{1-\alpha}m^{-1-\beta}\theta^2(m)) + O\left[n^{1-2\alpha}m^{-2\beta}\theta(m) \frac{\sigma\left(\frac{(m_1 m_2, r)}{(m_2, r)}\right)}{(m_1 m_2, r)}\right], & \text{如 } (m, r) \in \mathcal{A} \end{cases}$$

上式中的 (m, r) 等表示 m, r 的最大公约数, $\theta(m)$ 为 m 的无平方因子的约数个数, $\sigma(m)$ 为 m 的所有约数之和, 实数 $\alpha > 0, \beta < 0, m = m_2^2 m_1, m_1$ 为无平方因子数.

证明 当 $(m, r) \notin \mathcal{A}$ 时, 显然有 $Q_{m,r}(n) = 0$. 下面考虑 $(m, r) \in \mathcal{A}$ 的情形, 设 $\alpha > 0, \beta < 0$, 我们有

$$\begin{aligned} Q_{m,r}(n) &= \sum_{\substack{a \in \mathcal{A} \\ a \equiv r \pmod{m} \\ a < n}} 1 = \sum_{\substack{a < n \\ a \equiv r \pmod{m}}} \sum_{t^2 | a} \mu(t) = \sum_{\substack{t^2 d < n \\ t^2 d \equiv r \pmod{m}}} \mu(t) \\ &= \sum_{\substack{t < n^\alpha m^\beta \\ t^2 d < n \\ t^2 d \equiv r \pmod{m}}} \mu(t) + \sum_{\substack{t \geq n^\alpha m^\beta \\ t^2 d < n \\ t^2 d \equiv r \pmod{m}}} \mu(t) = S_1 + S_2 \quad (\text{设}) \end{aligned} \quad (1)$$

首先处理 S_1 (注意 $m = m_2^2 m_1, m_1 \in \mathcal{A}$).

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{t < n^\alpha m^\beta} \mu(t) \sum_{\substack{d < n/t^2 \\ t^2 d \equiv r \pmod{m}}} 1 = \sum_{\substack{t < n^\alpha m^\beta \\ (t^2, m) | r}} \mu(t) \left(\frac{n/t^2}{m/(t^2, m)} + O(1) \right) \\ &= \frac{n}{m} \sum_{\substack{t=1 \\ (t^2, m) | r}}^{\infty} \frac{\mu(t)(t^2, m)}{t^2} + O\left(\frac{n}{m} \sum_{\substack{t \geq n^\alpha m^\beta \\ (t^2, m) | r}} \frac{(t^2, m)}{t^2} \right) + O(n^\alpha m^\beta) \\ &= \frac{n}{m} \sum_{\substack{t=1 \\ (t^2, m) | r}}^{\infty} \frac{\mu(t)(t^2, m)}{t^2} + O\left(\frac{n}{m} (m_1, r) \sum_{t \geq n^\alpha m^\beta} \frac{1}{t^2} \right) + O(n^\alpha m^\beta) \\ &= \frac{n}{m} \sum_{\substack{t=1 \\ (t^2, m) | r}}^{\infty} \frac{\mu(t)(t^2, m)}{t^2} + O(n^{1-\alpha}m^{-1-\beta}(m_1, r)) + O(n^\alpha m^\beta) \end{aligned}$$

现在将上面和式中 t 的素因子分为两类, 第一类中的素数与 m 互素, 第二类中的素数为 m 的因子, 则第二类中的任一素数 p 也为 r 的因子, 且 $p|m$, 所以

$$\sum_{\substack{t=1 \\ (t^2, m) | r}}^{\infty} \frac{\mu(t)(t^2, m)}{t^2} = \prod_{p|m} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) \prod_{\substack{p|m \\ p \nmid r}} \left(1 - \frac{1}{p}\right)$$

从而

$$S_1 = \frac{n}{m} \prod_{p|m} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) \prod_{\substack{p|m \\ p \nmid r}} \left(1 - \frac{1}{p}\right) + O(n^{1-\alpha}m^{-1-\beta}(m_1, r)) + O(n^\alpha m^\beta) \quad (2)$$

为了估计 S_2 , 我们注意当 $(d, m) = 1$ 时, 同余式 $dt^2 \equiv r \pmod{m}$ 模 m 互不同余的解数 $\leq 2^{\omega(m)+2} = 4\theta(m)$. 实际上, 当 $(r, m) = 1$ 时这是熟知的结果^[3]. 若 $(r, m) = l > 1$, 注意 l 无平方因子, 设素数 $p|l$, 如果同余式有解 t , 则 $p^2 \nmid m$ (否则由 $p^2 | t^2$ 推出 $p^2 | r$, 从而 $p^2 | (m, r)$, 矛盾), 这样 $(m/l, l) = 1$, 且 $(r, m/l) = 1$, 于是同余式等价于

$$\begin{cases} dt^2 \equiv r \pmod{l} \\ dt^2 \equiv r \pmod{\frac{m}{l}} \end{cases} \quad \text{即} \quad \begin{cases} t^2 \equiv 0 \pmod{l} \\ dt^2 \equiv r \pmod{\frac{m}{l}} \end{cases}$$

故其模 m 之解数 $\leq 4\theta(m/l) \leq 4\theta(m)$.

现在设 $(d, m) = d_1, d = d_1 d_2$, 则 $(d_2, \frac{m}{d_1}) = 1$ 并且同余式 $dt^2 \equiv r \pmod{m}$

在 $d_1 \nmid r$ 时解数为 0, 在 $d_1 | r$ 时的解数 $\leq d_1 \theta(m/d_1)$. 注意在同余式有解时, 若记 $(\frac{r}{d_1}, \frac{m}{d_1}) = l'$, 则由上面的论证可知 $(\frac{m}{d_1 l'}, l') = 1$, 从而 $(r, m_2) | d_1$. 于是

$$\begin{aligned} S_2 &= \sum_{\substack{d^2 \leq n \\ d^2 \equiv r \pmod{m}}} \mu(t) = \sum_{d < n^{1-2\alpha} m^{-2\beta}} \sum_{\substack{a^2 n^{\beta} \leq t < \sqrt{n/d} \\ d^2 \equiv r \pmod{m}}} \mu(t) \\ &\leq \sum_{\substack{d_1 d_2 < n^{1-2\alpha} m^{-2\beta} \\ (d_2, m/d_1) = 1 \\ (r, m_2) | d_1, d_1 | r, d_1 | m}} \left(\frac{\sqrt{n/d_1 d_2}}{m/d_1} + 1 \right) \theta(m/d_1) \leq S_{21} + S_{22} \quad (\text{设}) \end{aligned} \tag{3}$$

其中

$$\begin{aligned} S_{21} &= \frac{\sqrt{n}}{m} \sum_{\substack{d_1 < n^{1-2\alpha} m^{-2\beta} \\ d_1 | (m, r)}} \sqrt{d_1} \theta\left(\frac{m}{d_1}\right) \sum_{d_2 < (n^{1-2\alpha} m^{-2\beta})/d_1} \frac{1}{\sqrt{d_2}} \\ &\ll \frac{\sqrt{n}}{m} \sum_{\substack{d_1 < n^{1-2\alpha} m^{-2\beta} \\ d_1 | (m, r)}} \sqrt{d_1} \theta\left(\frac{m}{d_1}\right) \sqrt{\frac{n^{1-2\alpha} m^{-2\beta}}{d_1}} \\ &\ll \frac{n^{1-\alpha}}{m^{1+\beta}} \sum_{d_1 | (m, r)} \theta\left(\frac{m}{d_1}\right) \leq \frac{n^{1-\alpha}}{m^{1+\beta}} O^2(m) \end{aligned} \tag{4}$$

而

$$\begin{aligned} S_{22} &= \sum_{\substack{d_1 d_2 < n^{1-2\alpha} m^{-2\beta} \\ (r, m_2) | d_1 \\ d_1 | (m, r)}} \theta\left(\frac{m}{d_1}\right) \leq \theta(m) \sum_{\substack{(r, m_2) | d_1 \\ d_1 | (m, r)}} \frac{n^{1-2\alpha} m^{-2\beta}}{d_1} \\ &= n^{1-2\alpha} m^{-2\beta} \theta(m) \sum_{\substack{(m_1, m_2, r) \\ d_1 | (m_2, r)}} \frac{1}{(m_2, r) d_1} \leq n^{1-2\alpha} m^{-2\beta} \theta(m) \frac{\sigma\left(\frac{(m_1 m_2, r)}{(m_2, r)}\right)}{(m_1 m_2, r)} \end{aligned} \tag{5}$$

综合(1)、(2)、(3)、(4)、(5)即得出基本引理.

在基本引理中令 $m = h^2$, 则 $m_1 = 1, (m_1, r) = 1$, 于是有:

推论1 如 $(r, h^2) \in \mathcal{A}$, 则

$$Q_{a^2, r}(n) = \frac{n}{h^2} \prod_{p|h} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) + O(n^\alpha h^{2\beta}) + O(n^{1-\alpha} h^{-2-\beta} \theta^2(h)) + O(n^{1-2\alpha} h^{-4\beta} \theta(h) \frac{1}{(h, r)})$$

在推论1中取 $\alpha = \frac{1}{2}, \beta = -\frac{1}{4}$, 并注意 $\theta^2(h) \ll h^\epsilon$ 则有

推论2 如 $(r, h^2) \in \mathcal{A}$, 则

$$Q_{a^2, r}(n) = \frac{n}{h^2} \prod_{p|h} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) + O(n^{1/2} h^{-1/2}) + O(h \theta(h) \frac{1}{(h, r)})$$

2 定理的证明

我们有

$$\begin{aligned} T(n) &= \sum_{\substack{a+b=n \\ a, b \in \mathcal{A}}} 1 = \sum_{a \in \mathcal{A}} \sum_{\substack{b \in \mathcal{A} \\ b \leq n-a}} \mu(h) = \sum_{h < \sqrt{n}} \mu(h) \sum_{\substack{a \in \mathcal{A} \\ a \equiv a \pmod{h^2} \\ a < n}} 1 \\ &= \sum_{h < \sqrt{n}} \mu(h) Q_{a^2, n}(n) = \sum_{h < x} \mu(h) Q_{a^2, n}(n) + \sum_{x < h < \sqrt{n}} \mu(h) Q_{a^2, n}(n) \\ &= T_1 + T_2 \text{ (设)} \end{aligned} \tag{6}$$

上式中的 x 是一个待定参数, 将在后面选取.

现在分别来处理 T_1 及 T_2 , 首先显然有

$$T_2 \ll \sum_{x < h < \sqrt{n}} \frac{n}{h^2} \ll \sum_{h > x} \frac{n}{h^2} \ll \frac{n}{x} \tag{7}$$

为了处理 T_1 , 我们注意, 当 $(h^2, n) \notin \mathcal{A}$ 时 $Q_{a^2, n}(n) = 0$, 于是将推论2中的结果代入 T_1 得出

$$T_1 = T_{11} + T_{12} + T_{13} \tag{8}$$

这里

$$\begin{aligned} T_{11} &= \sum_{\substack{h < x \\ (h^2, n) \in \mathcal{A}}} \mu(h) \frac{n}{h^2} \prod_{p|h} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) = n \sum_{\substack{h < x \\ (h^2, n) \in \mathcal{A}}} \frac{\mu(h)}{h^2} \prod_{p|h} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) \\ &= n \sum_{\substack{h=1 \\ (h^2, n) \in \mathcal{A}}}^{\infty} \frac{\mu(h)}{h^2} \prod_{p|h} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) + O\left(\frac{n}{x}\right) \\ &= n \prod_p \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) \sum_{\substack{h=1 \\ (h^2, n) \in \mathcal{A}}}^{\infty} \frac{\mu(h)}{h^2} \prod_{p|h} \left(1 - \frac{1}{p^2}\right)^{-1} + O\left(\frac{n}{x}\right) \\ &= n \prod_p \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) \prod_{p^2|n} \left[1 - \frac{1}{p^2(1 - \frac{1}{p^2})}\right] + O\left(\frac{n}{x}\right) \\ &= n \prod_p \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) \prod_{p^2|n} \left(\frac{p^2 - 2}{p^2 - 1}\right) + O\left(\frac{n}{x}\right) \\ &= n \prod_{p^2|n} \left(\frac{p^2 - 1}{p^2 - 2}\right) \prod_p \left(1 - \frac{1}{p^2}\right) \frac{p^2 - 2}{p^2 - 1} + O\left(\frac{n}{x}\right) \end{aligned}$$

$$= n \prod_{p^2|n} \left(1 + \frac{1}{p^2 - 2}\right) \prod_p \left(1 - \frac{2}{p^2}\right) + O\left(\frac{n}{x}\right) \quad (9)$$

$$T_{12} = \sum_{\substack{h < x \\ (h^2, n) \in \mathcal{A}}} \mu(h) O(n^{1/2} h^{-1/2}) \ll \sum_{h < x} n^{1/2} h^{-1/2} \ll n^{1/2} x^{1/2} \quad (10)$$

以及

$$\begin{aligned} T_{13} &= \sum_{\substack{h < x \\ (h^2, n) \in \mathcal{A}}} \mu(h) O\left(h\theta(h) \frac{1}{(h, n)}\right) \ll \sum_{h < x} h\theta(h) \\ &\leq \sum_{h < x} h \sum_{l|h} 1 = \sum_{l < x} l e = \sum_{e < x} e \sum_{l < x/e} l \\ &\leq \sum_{e < x} e \frac{x^2}{e^2} \ll x^2 \log x \end{aligned} \quad (11)$$

综合(6)、(7)、(8)、(9)、(10)、(11)得到

$$T(n) = n \prod_{p^2|n} \left(1 + \frac{1}{p^2 - 2}\right) \prod_p \left(1 - \frac{2}{p^2}\right) + O(n^{1/2} x^{1/2}) + O(x^2 \log x)$$

令 $x = n^{1/3}$ 即得定理, 证毕.

参 考 文 献

[1] Estermann T, *J. London Math. Soc.*, 6(1931), 37-40.
 [2] Cohen E, *Duke Math. J.*, 32(1965), 181-185.
 [3] Vinogradov I M, 数论基础, 高等教育出版社, 北京, 1956, 88.

On the Rerresentations of a Number as the Sum of Two Square-free Numbers

Yu Hongbing

Wang Qiaoling

(University of Science and Technology of China)

(Nanjing Normal University)

Abstract

For a positive integer n , let \mathcal{A} be the set of square-free integers and $T(n)$ be the number of ordered pairs $\{a, b\}$ of elements in \mathcal{A} such that $n = a + b$, we prove the following theorem:

$$T(n) = cn\rho(n) + O(n^{2/3} \log n)$$

where $c = \prod_p \left(1 - \frac{2}{p^2}\right)$, $\rho(n) = \prod_{p^2|n} \left(1 + \frac{1}{p^2 - 2}\right)$, p is a prime.

This is an improvement to a result of Cohen.

Key words: square-free integer, asymptotic formula

复合区间消去法在优化 $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$ 制备条件中的应用

陆肖璞 吴耿锋⁺ 周佩玲⁺ 施朝淑

(物理系)

(⁺电子技术部)

摘 要

本文以探索发光材料 $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$ 的最佳制备条件为例,介绍了区间消去法在优化制备条件中的应用. 在多因素条件的制备过程中,由于采用了降维和复合区间消去法,大大减少了试验次数,特别是对某些未知的新材料,初始制备条件复盖的范围较宽的情况下,本文介绍的方法可以最少的试验次数找到符合要求的最佳制备条件.

关键词:制备条件,优选法,搜索法,降维,复合区间消去法,黄金分割

中图法分类号:TP202.7

1 引言

在许多新材料的制备中,制备条件直接影响到新材料的各种性能. 例如, $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$ 是一种良好的发光材料,不同的灼烧温度和不同的 Eu 掺杂浓度将直接影响到 $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$ 的发光强度及其他性能. 由于物理研究本身尚未清晰地揭示该材料的发光特性与制备条件的内在关系,因此很难用一种函数描述材料的某一性能同制备条件之间的内在联系,这就给利用数字计算机直接进行数字仿真从而优化参数带来困难. 科技人员为了摸索最佳制备条件,通常要进行大量的试验,既费时又费料. 本文介绍的复合区间消去法优化制备条件是一种基于数值计算的限定次数的试验方法,将这种复合区间消去法和降维法结合起来,可实现多因素条件的选优.

2 优化策略考虑

制备条件的优化实际上是一个参数最优化问题^[1]。通常解决参数最优化的办法有两大类,一种是间接寻优法也称解析法;一种是直接寻优法也称搜索法。前者只适用于目标函数及约束有明显解析表达式的情况。求解的方法是先求出最优的必要条件,得到一组方程或不等式,再来求解这组方程或不等式。但是当目标函数比较复杂或不能用变量显函数表示时,就不能用上述解析法,通常是用直接搜索法迭代搜索到最优点。这种方法特别适用于已有部分实践经验再经有限次数的试验从而迅速找到最优参数的情况。发光材料的制备常属这种情况,这是因为该类材料制备中所要达到的目标为该材料在某一波长下的发光特性(如发光强度等),就是说,目标函数为单变量单峰函数,而且这样的函数往往无法用解析式表示,显然采用搜索法优化制备条件是合适的,它仅仅利用目标函数的数值(如发光强度的相对值),改变制备条件,一步一步搜索,以求得目标函数的峰值,即最优点。

发光材料制备通常受多种因素影响,如样品的灼烧温度、灼烧时间和掺杂浓度等。对多种因素寻优就意味着要进行多维搜索。我们的优化策略包含两方面的内容,一是用降维法把多维搜索转变为一维搜索;二是考虑到对于采用箱式炉作为制备炉的材料,在某一温度条件下常常可以同时做几个样品,因而采用黄金分割法和等间隔法相结合的复合区间消去法作为一维搜索策略是合适的。所谓区间消去法是通过比较目标函数的数值,逐步缩小搜索区间直到最佳点所在的范围满足允许误差为止。下面就优化 $\text{BaBr}_2 \cdot \text{Eu}$ 的制备条件具体介绍我们的优化策略。

2.1 降维策略(座标轮换法)

$\text{BaBr}_2 \cdot \text{Eu}$ 制备中的主要影响因素是灼烧温度和 Eu 掺杂浓度。如图1所示,我们对温度和掺杂浓度作二维搜索, Y 座标表示灼烧温度, X 座标表示掺杂浓度。采用座标轮换法可以很方便地将二维搜索转化为一维搜索。具体方法如下:

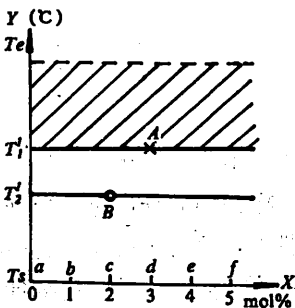


图1 二维搜索示意图
($Q(B)$ 优于 $Q(A)$ 时的区间消去情况)

在 Y 轴上,用黄金分割法确定一点,如 T_1 (上标表示第 n 次区间消去,下标表示该次区间消去时的温度变量)。然后在该温度下转向 X 轴,用等间隔法作一维搜索,找出最佳掺杂浓度,设为 A 点;接着再转向 Y 轴,在第二个寻优点 T_2 找出对应该温度的最佳掺杂浓度,设为 B 点。比较 A 点和 B 点对应的目标函数值 $Q(A)$ 和 $Q(B)$ (在我们的例子中是比较发光材料的相对亮度)。如果 A 点比 B 点好,则消去 T_2 温度线以下的区间,反之则消去 T_1 温度线以上的区间。特别当 $Q(A) = Q(B)$ 时则同时消去 T_1 温度线以上和 T_2 温度线以下的区间,这就完成了第一次区间消去过程。在剩下的

区间继续用上述坐标轮换法作区间消去直至找到最佳的灼烧温度和最佳掺杂浓度为止。

2.2 Y 轴的搜索策略(黄金分割法,又称 0.618 法)

在由经验确定的温度搜索范围内,用黄金分割法计算出温度试验点^[2],这种方法计算过程简单、试验次数少。如图2(a)所示,设温度搜索原始区间为 $[T_s, T_e]$, T_s 表示起始搜索温度(start

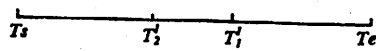
temperature), T_e 表示终止搜索温度(end temperature). 第一轮搜索要取两个点以便进行比较, 设为 T_1 和 T_2 , 按黄金分割公式有

$$T_1 = T_s + \lambda(T_e - T_s)$$

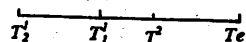
$$T_2 = T_e - \lambda(T_e - T_s) = T_s + T_e - T_1$$

其中 λ 为黄金分割比, $\lambda = 0.618$.

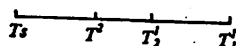
对上述两个点进行试验以后可以比较它们对应的目标函数值. 如图2(b)所示, 当 $Q(T_1) > Q(T_2)$ 时, 截去 T_2 以左的区间, 然后在剩余区间 $[T_2, T_e]$ 中按黄金分割法找到一个新的试验点 T^2 , $T^2 = T_e + T_2 - T_1$. 图2(c)表示的是当 $Q(T_1) < Q(T_2)$ 时的情况. 图2(d)表示的是一种特殊情况, 即 $Q(T_1) = Q(T_2)$ 时必须截去 T_1 和 T_2 两侧的区域, 然后以 T_2 为新的 T_s , T_1 为新的 T_e , 计算两个黄金试验点 T_1^2 和 T_2^2 , 显然有 $T_1^2 = T_2 + \lambda(T_1 - T_2)$, $T_2^2 = (T_1 + T_2) - T_1^2$. 如此一步一步将搜索区间缩小, 直至



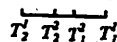
(a) 第一轮搜索取两个温度试验点 T_1 和 T_2



(b) $Q(T_1) > Q(T_2)$ 时区间消去的情况, T^2 为新试验点



(c) $Q(T_1) < Q(T_2)$ 时区间消去的情况, T^2 为新试验点



(d) $Q(T_1) = Q(T_2)$ 时区间消去的情况, T_1^2, T_2^2 为新试验点

图2 黄金分割法区间消去示意图

至在缩小的区间中两个试验点的温度差值小于某一个给定的 ϵ 为止. 例如在图2(b)中应比较 $T^2 - T_1$ 是否小于 ϵ , 如小于 ϵ 则最佳灼烧温度 $T = 1/2(T^2 + T_1)$. 同样, 在图2(c)中应比较 $T_2 - T^2$ 的差值. ϵ 的确定应视试验所要求的精度而确定, 例如箱式炉的温度误差通常在 $\pm 5^\circ\text{C}$ 以上, 因此 ϵ 取小于 10°C 则意义不大了.

2.3 X 轴的搜索策略(等间隔法)

X 轴方向对 Eu 掺杂浓度寻优. 由于箱式炉在某一个温度下可同时灼烧多个样品, 因此 X 轴方向采用等间隔搜索法比较合适. 如图1所示, 将可能的掺杂浓度范围 $0 \sim 5\text{mol}\%$ 等分为五个区间, 然后对应某一个温度同时做五个不同掺杂浓度的样品, 即浓度分别为 $1\text{mol}\%$ 、 $2\text{mol}\%$ 、 $3\text{mol}\%$ 、 $4\text{mol}\%$ 和 $5\text{mol}\%$ (b, c, d, e, f 点), 每次选取五个点中的最佳发光强度作为该温度下的目标函数值 $Q_{\max}(T)$ (为简化起见, 以下提到的 $Q(T)$ 均视为 $Q_{\max}(T)$). 如果最佳点落在某一端, 即 b 或 f , 则需在同一温度下选取该端点相邻的两点作为新的 Eu 浓度试验范围, 然后再做一次试验. 为了避免这种情况的出现, 第一轮浓度搜索时不妨把范围选得大一些.

3 试验及结果

根据上述优化策略, 我们首先确定温度试验范围为 $650^\circ\text{C} - 900^\circ\text{C}$, 然后按黄金分割法计算, 将可能要进行的有限次试验的温度值列成如图3所示的树状结构示意图. 两个树状结构的根部为第一轮搜索时的两个黄金分割点. 当 $Q(T_1)$ 优于 $Q(T_2)$ 时则沿上部树状搜索, 反之沿下部树状搜索. 除第一轮搜索必须做两个温度分割点外, 以后每一轮搜索一般只要做一个新的分割点(只有当相比较的两个目标函数值相等时, 才需同时做两个新的分割点). 在本示意图中, 凡是当新试验点的目标函数值优于原最佳点时, 则下一步搜索沿新结点的右上方向进行, 反之沿新结点的右下方进行. 例如第一轮搜索中发现 $Q(T_2)$ 优于 $Q(T_1)$, 则沿下部树状搜索.

第二轮搜索应以710℃作为 T^2 ,当该结点的 $Q(710)$ 劣于 $Q(745)$ 时,下一轮温度试验点为该结点的右下方向的结点值,即770℃;反之则应取该结点的右上方的结点值685℃作为试验点.值得注意的是,目标函数的比较并不都是发生在相邻的两个结点上,而是新试验点同缩小以后的区间中保留的上一轮试验的最优点进行比较.当然图3不包括 $Q(T_1^i)=Q(T_2^i)$ 的情况,但搜索的原理是一样的.

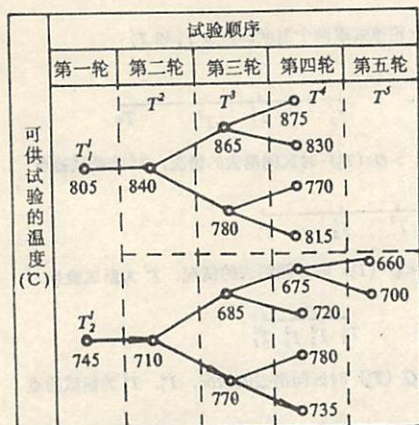


图3 树状结构温度搜索示意图

接下来选取 $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$ 中 Eu 掺杂浓度范围为 0—5mol%, 并等分为五个间隔, 每个间隔为 1mol%. 表1给出了前三轮寻优试验记录. 从表1中可以看出, 第一轮两个试验, $Q(745)=82$, $Q(805)=70$, 即 745℃点优于 805℃点, 最佳 Eu 浓度均为 2mol%; 然后按图3下部树状找到第二轮新试验点为 710℃. 试验结果是 $Q(710)$ 劣于 (745), 最佳 Eu 浓度为 3mol%; 进一步按树状结构选取 770℃作为第三轮试验点. 结果 $Q(770)$ 劣于 $Q(745)$, 最佳 Eu 浓度为 2mol%; 沿树状继续搜索可得第四轮新试验点为 735℃, 同时考虑到最佳 Eu 浓度都集中在 2mol% 和 3mol%, 为求得较高的精度, 将 Eu 浓度范围缩小为 1.5mol%~3.5mol% 并作四等分, 间隔为 0.5mol%. 试验结果由表2可知在 735℃时, 最佳的相对发光强度 $Q(735)=81$, 最佳 Eu 浓度为 2mol%. 显然, 由于 $Q(735)$ 与 $Q(745)$ 几乎相等, 同时考虑到受箱式炉控温精度的限制, 选取 $\varepsilon=10^\circ\text{C}$, 且因 $745^\circ\text{C}-735^\circ\text{C}=10^\circ\text{C}$ 已在 ε 范围之内, 所以最佳灼烧温度 T_{opt} 可视为 $1/2(745^\circ\text{C}+735^\circ\text{C})=740^\circ\text{C}$, 最佳掺杂浓度 C_{opt} 取 2mol%. 图3中的粗线条为实际搜索路径. 图4为不同温度条件下 $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$ 掺杂浓度与发光强度之间的关系曲线. 样品的相对发光强度是 850 型荧光分光光度计测量的, 激发波长为 254nm, 发射峰波长为 408nm.

表1 前三轮发光强度实验记录 (Eu 掺杂浓度间隔为 1mol%)

试验	温度(°C)	Eu 浓度(mol%)				
		1	2	3	4	5
第一轮	805	64	70	67	62	56
	745	70	82	75	66	63
第二轮	710	50	55	60	57	52
第三轮	770	67	75	71	65	62

表2 第四轮发光强度实验记录 (Eu 掺杂浓度间隔为 0.5mol%)

试验	温度(°C)	Eu 浓度(mol%)				
		1.5	2.0	2.5	3.0	3.5
第四轮	735	77	81	78	74	70

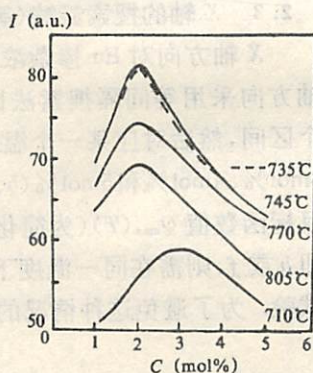


图4 不同温度条件下 $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$ 掺杂浓度与发光强度之间的关系

4 几点讨论

(1) 当最优点搜索到接近温度边界(即 T_s 或 T_e)时,说明最佳点有可能落在搜索范围以外,这时可用扩展搜索边界的办法. 例如在图3中,假设搜索路径为 $745^\circ\text{C} \rightarrow 710^\circ\text{C} \rightarrow 685^\circ\text{C} \rightarrow 675^\circ\text{C} \rightarrow 660^\circ\text{C}$, 如果第五轮试验仍然表明 660°C 为相对最佳点而这个值又很接近 $T_s = 650^\circ\text{C}$ 时,我们可将 T_s 延伸,比如令 $T_s = 550^\circ\text{C}$, 然后由 675°C 、 660°C 和 550°C 三个点按黄金分割法找出下一个试验点 565°C , 再继续寻优. 计算表明,这样搜索的次数比一开始就在 $550^\circ\text{C} - 900^\circ\text{C}$ 范围内搜索的次数要略多一些. 所以在没有把握的时候,可将最初的搜索范围取得大一些.

(2) 对多于两个以上因素的寻优要复杂一些. 例如对三个因素寻优可转变为三维坐标搜索. 如果说,二维搜索是做平面搜索,那么三维搜索就是做立体(或长方体)搜索. 通常可用“对折”长方体的降维法. 方法是先选取在 X 轴上的搜索范围的中点,过该点将长方体切成两半,切面平行由 Y 和 Z 轴组成的平面,然后对切面作二维搜索,找到一个相对最佳点;依次选取 Y 轴和 Z 轴上的中点,可以在另外两个切面上找到两个相对最佳点. 比较这三个相对最佳点,找出其中的最优点,然后留下含有最优点的四分之一长方体,再继续搜索下去,直至找到全局最佳点.

参 考 文 献

- [1] 蔡宜三,最优化与最优控制,清华大学出版社,北京,1982:21-23.
 [2] 任兴权,控制系统计算机仿真,机械工业出版社,北京,1988:154-157.

The Applications of Combined Region Elimination Method to Optimization of Preparation Conditions of $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$

Lu Xiaopu Wu Gengfeng⁺ Zhou Peiling⁺ Shi Chaosu

(Physics Department)

(+ Electronic Technology Department)

Abstract

The aim of this paper is to introduce the applications of the method of Combined Region Elimination (CRE) to optimization of preparation conditions via preparing luminescent material $\text{BaBr}_2:\text{Eu}$. With the adoption of the method of the reduction of dimensions and CRE, in preparations influenced by multiple factors, the number of experiments is greatly reduced. Particularly for those new materials whose preparation conditions cover a wide region, the method introduced in the paper can offer a good way to finding optimum preparation conditions by doing the minimum number of experiments.

Key words: preparation condition, optimization, method of search, method of combined region elimination, method of golden section

可见光波段发光多孔硅膜的结构特征研究

赵特秀 吕智慧 孙国喜 叶 坚 王晓平 刘磁辉

(物 理 系)

吴自勤

(基础物理中心)

摘 要

采用在 HF 溶液中阳极处理硅单晶片的方法制备了具有可见光波段发光特性的多孔硅膜。应用 X 光衍射技术及激光喇曼散射谱研究了发光多孔硅膜的结构特征。研究表明:纳米量级尺寸是多孔硅膜的一个重要特征。估计多孔硅柱横截面直径在几到十几纳米之间。

关键词: 多孔硅, 量子线, XRD, Raman 谱

中图法分类: O484.5

1 引言

目前在半导体光电子材料中占主要地位的是具有直接带隙的化合物半导体,特别是 III-V 族二元及三元化合物。近来,从多孔硅材料上观察到了可见光波段的光致发光和电致发光现象,其强度达到了化合物半导体的高输出水平^[1,2]。这一现象引起了半导体学界和光电子学界的极大注意。因为这一发现可能会开拓以硅为基础的光电子学的发展,使利用高水平的硅器件工艺和集成电路设计技术来制作硅显示元件和电光器件成为可能。

关于多孔硅材料的发光机理,很多人认为来自于量子线效应或量子点效应,也有人认为多孔硅在可见光波段的发光与 F、O、H 等元素的介入有关。本工作在对多孔硅结构研究的基础上^[3,4],对可见光波段光致发光多孔硅膜的结构特征进行了研究。我们应用 X 光衍射技术及激

光喇曼散射谱分析了发光多孔硅膜及单晶硅材料的结构差别。实验结果表明,纳米量级尺寸的结构是多孔硅膜的一个重要结构特征。

2 实验与结果分析

选取P型硅单晶片作为基片,取向为 $\langle 100 \rangle$,电阻率为 $10\Omega\cdot\text{cm}$ 。以硅单晶片作为阳极,高纯P₄片作为阴极进行电解腐蚀,腐蚀液由48%的HF溶液与去离子水按1:1的容积比配制而成。电解电流密度恒定为 $20\text{mA}/\text{cm}^2$,典型的阴极处理时间为1小时,处理后的硅片再置于48%的HF溶液中在避光条件下浸泡4小时。这样,得到了表面呈深棕色的多孔硅膜样品。

将由上述方法制备得到的多孔硅膜样品置于波长为 488.0nm 的 Ar^+ 激光束下,即可发出肉眼可见的红光荧光。图1为一典型的多孔硅室温光致发光谱。A点为其峰值位置,对应波数为 13970cm^{-1} (波长为 716nm ,或能量 1.73eV)。B点和C点分别为半峰高对应的短波带边和长波带边,波数值为 15380cm^{-1} 和 13080cm^{-1} ,由此可得发光峰的半高宽(FWHM)约为 0.28eV 。图中左侧的尖锐峰为Si-Si键的TO振动膜的喇曼峰。

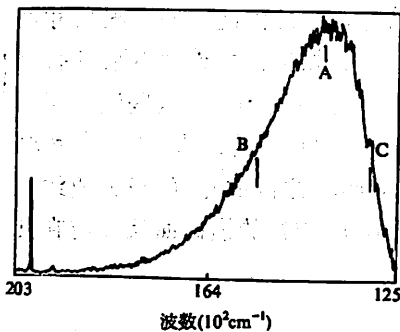


图1 多孔硅的室温光致发光谱

同样条件下制备而得的不同样品的光致发光谱基本一致,说明实验有良好的重复性。

具有图1所示的室温光致发光谱的样品在 260nm 紫外光的激发下,可得到峰值在 720nm 处的光致发光谱,与绿色 Ar^+ 激光激发的谱峰基本一致。而将未经阳极处理的硅片进行同样的测量,则无论用激光激发还是用紫外光激发,在可见光波段及其附近均无发光现象产生。将具有发光特性的样品经超声处理1分钟后,发光特性消失。这可能是由于超声波破坏了多孔硅的量子线阵列所致。不过,这一推断还需要进一步的实验验证(如高分辨率电镜的直接观察等)。

我们对具有发光特性的样品进行了X光衍射研究。实验在Eeigerflex D/mex-rA转靶X射线衍射仪上进行,采用Cu靶,波长为 1.54\AA 。为了把与多孔硅膜中的尺寸效应有关的信息分离出来,我们作了三种不同方式的X光衍射测量,即:(a) θ 和 2θ 同步扫描。(b)固定 2θ 扫描 θ 。(c)固定 θ 扫描 2θ 。其中 θ 和 2θ 的几何定义见图2。在此三种方式下测量得到的相应谱图分别如图3(a),(b),(c)所示。

图3(a)为 θ 和 2θ 同步扫描测量,即为常规的X光衍射图。图中给出的是(004)衍射峰,峰位对应的 2θ 值为 69.1° ,图中A曲线对应经过前述处理的样品,表面有多孔硅膜,B曲线为未经处理的硅单晶样品测量结果。由图可见,多孔硅的X射线衍射峰比单晶硅要宽,表明在多孔硅膜中垂直于表面的硅柱中存在着应力^[3]。A曲线和B曲线相比,更为明显的差别是底部显著展宽,我们认为这主要是由硅柱的有限长度引起的。图3(b)是将 2θ 固定于图3(a)的峰值位置,对 θ 进行扫描得到的谱图,即所谓摇摆曲线,其峰值位置是 $\theta=32.7^\circ$ 。亦即当样品置于 $\theta=32.7^\circ$ 时,最佳地满足(004)峰的Bragg条件。图3(c)为将样品位置 θ 固定于 32° ,即有意使样品位置略偏离(004)峰的极大条件而得到的 2θ 扫描谱图。这样,图3(c)中的谱峰主要反映了图3(a)中

A 曲线近底都特征,由此,可大致估计多孔硅中柱的尺寸数量级.

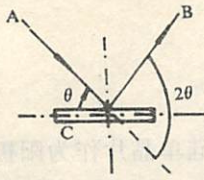


图2 X光衍射测量的示意图

A 光源, B 探测器

C 样品, θ 入射角, 2θ 散射角

X 射线衍射峰的半高宽与晶粒尺寸大致有如下关系

$$\beta = k\lambda/D\cos\theta$$

式中 β 为衍射峰的半高宽, θ 为入射光束与衍射晶面的夹角, D 为晶粒尺度, k 为常数. 由此关系出发,可从图3(c)估算得到对应此曲线的 $D \approx 6\text{nm}$. 即可近似认为多孔硅中硅柱的平均尺寸为 6nm . 图3(a)和图3(b)的数据经处理后也可估算多孔硅中硅柱的平均尺寸,得到的结果亦为纳米量级.

对同一样品还进行了激光喇曼散射研究. 实验在配有三光栅单色仪的 SPEX—1403 喇曼谱仪上进行,采用背散射方式, Ar^+ 激光的波长为 514.5nm , 实验结果如图4所示. 图中, A 曲线是多孔硅膜的喇曼散射谱, B 曲线是单晶硅片的相应谱图. A、B 曲线均在频移 520cm^{-1} 处出现尖锐窄峰, 对应于单晶硅在 Γ 点的 TO 振动模. A 曲线中没有出现标志非晶硅特征的频移 480cm^{-1} 附近的宽峰, 表明在多孔硅柱中仍保持了单晶点阵, 而非非晶状态.

但是, 多孔硅的喇曼特征峰(A 曲线)出现了明显的不对称性. 这是由硅柱的有限尺寸而引起的效应. 因为晶粒的尺寸效应限制了振动波只在晶粒内传播, 振动波的傅里叶展开就相当于以许多个波矢传播的声子被激活. 由于单晶硅的光学支振动在 Γ 点最大, 这些激活声子叠加的结果就使 Raman 峰向低波数方向移动. 图中 C 曲线是 $(A-B) \times 2$ 的结果, 即 C 曲线强调了多孔硅中的尺寸效应. 由图可见, C 曲线呈现为在 $420-515\text{cm}^{-1}$ 之间的宽峰, 极大值约在 500cm^{-1} 附近. 对照已有的对微晶硅材料研究的结果^[5,6], 可以估计, 硅柱的横截面尺寸应在几个纳米到十几个纳米之间.

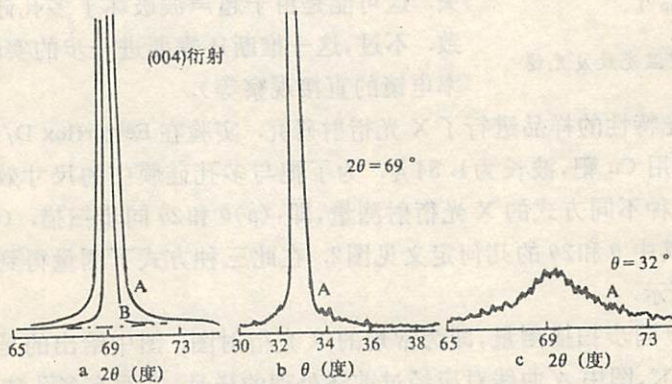


图3 三种X光衍射谱图

(a) θ 和 2θ 同步扫描, (b) 固定 2θ 扫描 θ , (c) 固定 θ 扫描 2θ

A 多孔硅膜样品, B 单晶硅样品

图5是另一个具有较厚多孔硅膜层样品的 Raman 谱. 制备该样品时的电解电流密度是 $40\text{mA}/\text{cm}^2$, 处理时间为 1.5 小时, 其他实验条件与图4的样品相同. 由图5可见, 厚层多孔硅膜的 Raman 谱的形状与图4中 C 曲线非常相似, 峰值也在 500cm^{-1} 附近. 说明前述的对 Raman 谱

的数据处理的确强调了多孔硅的结构特征,即纳米量级的尺寸效应.

在阳极处理过程中,置于阳极的P型硅不断被氧化、溶解,腐蚀形成大量的孔,使硅单晶形成垂直于表面的硅柱阵列^[1]. 由于硅柱尺寸很小,最后硅柱的尺寸由量子效应限定;当硅柱小到某一范围时,电荷载流子的量子限制使溶解反应停止. 这些硅柱的量子线效应也使材料的有效带隙增加. 假设硅柱(量子线)的截面为边长 L 的正方形,则其由量子尺寸效应引起的带隙的增加为:

$$\Delta E = \Delta E_v + \Delta E_c = \frac{h^2}{4m_v^* L^2} + \frac{h^2}{4m_c^* L^2}$$

式中, ΔE_v 和 ΔE_c 分别为空穴和电子对带隙增宽的贡献, m_v^* 和 m_c^* 为空穴和电子的有效质量. 据此关系可由有效带宽估计硅柱的量子尺寸^[7]. 如对应图1中峰值位置,可估算得到硅柱的尺寸约为2.6nm.

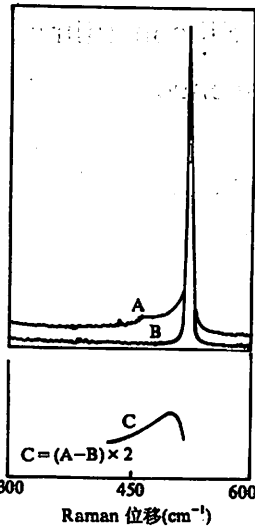


图4 多孔硅和单晶硅的Raman 散射谱图

A—多孔硅膜, B—单晶硅片, C=(A-B)×2

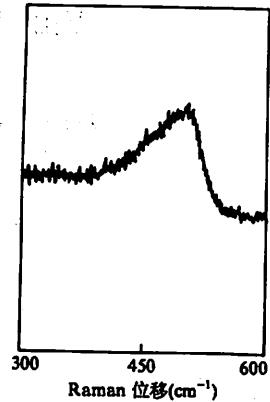


图5 多孔硅膜层较厚时的Raman 谱图

3 结束语

本工作通过X光衍射测量及激光喇曼谱测量初步讨论了可见光波段发光多孔硅膜的结构特征. 实验结果表明:纳米量级的量子尺寸是多孔硅膜的一个重要结构特征. 多孔硅膜样品的X光衍射谱和喇曼散射谱都表明了样品中纳米量级的硅柱引起的效应. 这些效应是与发光特性相联系的. 当用超声波破坏这样的量子阵列后,发光特性随之消失.

对中国科学技术大学结构分析开放实验室的周贵恩、许存义等同志的帮助表示深切的谢意.

参 考 文 献

- [1] Canham L T, *Appl. Phys. Lett.*, **57**(1990), 1046.
- [2] Halimaoui A, Oules C, Bomchil G *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **59**(1991), 304.
- [3] Unagami T and Seki M, *J. Electrochem. Soc.*, **125**(1978), 1139.
- [4] Ito T, Yasumatsu T, Watabe H and Hiraki A, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **29**(1990), L201.
- [5] Okada T, Iwaki T, Yamamoto K *et al.*, *Solid State Commun.*, **49**(1984), 809.
- [6] Hayashi S, Abe H, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **23**(1984), L824.
- [7] Lehmann V and Gosele U, *Appl. Phys. Lett.*, **58**(1991), 856.

Structure Characteristic of Porous Silicon Films With Visible Photoluminescence

Zhao Textiu Lü Zhihui Sun Guoxi Ye Jian
Wang Xiaoping Liu Cihui

(Department of Physics)

Wu Ziqin

(Center of Fundamental Physics)

Abstract

The Porous silicon films producing visible photoluminescence are prepared by anodization of p-type single-crystal Si wafers in hydrofluoric acid solution. The structural characteristic of these porous silicon films are studied by X-ray diffraction technology and Laser Raman scattering measurement. It is shown that the quantum dimension with nanometer order size is an important structural characteristic of porous silicon films.

Key words: porous silicon, quantum wire, XRD, Raman spectroscopy

用碰撞络合物模型计算 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 电子态猝灭截面

余忠华 陈从香 陈嵘嵘

(近代化学系)

摘 要

依据碰撞络合物模型,用最大作用势和取向平均两种方法计算了 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 自由基被23种分子猝灭的猝灭截面及其与温度的关系. 讨论了用碰撞络合物模型计算电子激发态粒子猝灭截面的适用范围. 低温区,在碰撞络合物形成过程中无位垒(除离心位垒外)的体系可以得到较满意的结果,否则不能正确预言猝灭截面与温度的关系;但在大的温度区间内,特别在高温区,适用性会变好.

关键词: $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$, 猝灭截面, 碰撞络合物模型

中图法分类号: O643. 11

1 引言

近十几年来,由于 CH 自由基在燃烧化学和大气化学中的重要性,人们已对它进行了广泛的实验和理论研究^[1-12],但对有关的碰撞过程细节还知之不多. 已有的实验结果显示 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 的电子态猝灭截面较大,有的接近甚至超过气动截面. 这种情况对于 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的碰撞猝灭过程更加明显,用碰撞络合物理论模型能较好地解释这一实验结果^[13,14]. 这种模型很少用于 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 的电子态猝灭的研究^[9]. 本文用碰撞络合物模型来计算 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 被一些碰撞伴侣分子猝灭的截面,并讨论了该模型对于 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 电子态猝灭的适用性.

2 碰撞络合物模型及计算方法

碰撞络合物模型是由 Fairchild 等人提出的^[13]. 它用分子之间的多极吸引势和离心势作为

相互作用势。在本文中,取 $\text{CH}(A^2\Delta)$ (以后记为 CH^*) 和碰撞伴侣分子 (记为 M) 的偶极-偶极、偶极-四极、偶极-诱导偶极相互作用和色散这四种分子间相互作用势作为 CH^* 和 M 之间的吸引势。这些分子之间力可以由 CH^* 和 M 的偶极矩 μ 、四极矩 Q 、极化率 α 和电离势 I 计算而得到^[15]。前三种分子间力与 CH^* 和 M 之间的相对取向有关。为了计算方便,我们取这三种分子间力最大值和平均值时的表达式^[13,15],其中四极矩 Q 值都取绝对值。计算方法详见表1。

表1 计算多极相互作用的表达式

作用力	最大取向方法	取向平均方法
偶极-偶极	$-2\mu_a\mu_b/r^3$	$-2\mu_a^2\mu_b^2/3kTr^6$
偶极-四极	$-3(Q_a\mu_b + \mu_aQ_b)/2r^4$	$-(\mu_a^2Q_b^2 + \mu_b^2Q_a^2)/kTr^6$
偶极-诱导偶极	$-2(\mu_a^2\alpha_b + \mu_b^2\alpha_a)/r^6$	$-(\mu_a^2\alpha_b + \mu_b^2\alpha_a)/r^6$
色散	$-3\alpha_a\alpha_b I_a I_b / 2(I_a + I_b)r^6$	$-3\alpha_a\alpha_b I_a I_b / 2(I_a + I_b)r^6$

以最大值取向时为例,碰撞过程的有效势为

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{Eb^2}{r^2} - \frac{C_3}{r^3} - \frac{C_4}{r^4} - \frac{C_6}{r^6}$$

式中第一项为离心势,后面三项为四种分子间吸引势之和。 E 是 CH^* 和 M 在无限远时的初始相对动能, b 为碰撞参数, r 是 CH^* 和 M 之间的距离。该有效势有一个极大值 $V_{\text{max}}(R)$ 。

在某一 E 时,总存在一 b_{max} ,使 E 等于 $V_{\text{max}}(R)$,碰撞分子对越过能垒面形成碰撞络合物 $\text{CH}^* - M$,随后 $\text{CH}^* - M$ 以几率 p 分解为产物或基态 CH 和 M ,从而求得络合物形成截面 $\sigma_{cf}(E) = \pi b_{\text{max}}^2$ 。对 $\sigma_{cf}(E)$ 统计求和,得到总的生成截面 $\langle \sigma_{cf} \rangle$:

$$\langle \sigma_{cf} \rangle = \frac{1}{(kT)^2} \int_0^\infty \sigma_{cf}(E) E \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE$$

那么碰撞猝灭截面 $\sigma_0 = p \langle \sigma_{cf} \rangle$ 。

不同的碰撞伴侣分子,几率 p 应是不同的。对于 $\text{CH}^* - M$ 并不知道其内部运动状态,不能事先计算出 p 值再求 σ_0 。 $\langle \sigma_{cf} \rangle$ 是 CH^* 的碰撞猝灭截面的上限。往往根据计算出的 $\langle \sigma_{cf} \rangle$ 和实验值 σ_0 来确定几率 p 的大小。

具体计算方法为:令 $dV_{\text{eff}}(r)/dr = 0$,设 R 为此方程的根,消去 Eb^2 可得 $V_{\text{eff}}(r)$ 在某一 Eb^2 值下的极大值为

$$V_{\text{max}}(R) = \frac{0.5C_3}{R^3} + \frac{C_4}{R^4} + \frac{2C_6}{R^6}$$

令 $V_{\text{max}}(E)/E = 1$,用牛顿法求此方程的根 R_0 ,则

$$\sigma_{cf}(E) = \pi R_0^2 \left(E + \frac{C_3}{R_0^3} + \frac{C_4}{R_0^4} + \frac{C_6}{R_0^6} \right) / E$$

$$\langle \sigma_{cf} \rangle = \int_0^\infty \sigma_{cf}(E) \frac{E}{kT} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) d\left(\frac{E}{kT}\right)$$

用 Gauss-Lagurre 积分公式^[16],

$$\int_0^\infty f(x) e^{-x} dx = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$$

计算 $\langle \sigma_{cf} \rangle$,节点数 n 取6。

对取向平均值,计算方法相同.

3 结果和讨论

我们计算了23种碰撞伴侣分子在300K时对CH(A²Δ)的猝灭截面上限,即碰撞络合物生成总截面(σ_{cf}). 计算中使用的参数、实验结果及本文的计算结果列于表2. CH(A²Δ)的偶极矩 Q 和四极矩 μ 取自 Lie 的计算值^[17],极化率 α 近似取 BH 的值,电离势 I 由 CH(X²Π)的电离势减去 CH 的 A 态和 X 态之间的能量差得到. 四极矩数值都取绝对值,有些是仿照文献[14]估算出的.

表2 计算中使用的参数、实验结果及本文计算结果(截面单位 Å²)

分子	μ^a (D)	α^a (Å ³)	Q^b (10 ⁻²⁸ esu. cm ²)	IP^c (eV)	σ_0 (Å ²) 实验值 ^[14]	$\langle\sigma_{cf}\rangle$ 最大取向	$\langle\sigma_{cf}\rangle$ 取向平均
CS ₂	0	8.86	1.8	10.08	48.0 ^d	113	104
CCl ₄	0	11.2	0	11.47	25.0 ^d	118	114
CHCl ₃	1.60	9.5	3.5 ^e	11.42	26.6 ^d	152	111
CH ₂ Cl ₂	1.06	7.93	4.10	11.35	13.1 ^f	166	108
cyclo-C ₆ H ₁₂	0	11.0	0.9 ^e	9.8	36.2 ^d	118	111
H ₂	0	0.81	0.66	15.43	0.94	55	50
N ₂	0	1.74	1.52	15.58	0.05	74	64
O ₂	0	1.58	0.39	12.06	3.3	64	60
CO	0.11	1.95	2.50	14.01	7.0	84	67
NO	0.15	1.70	1.80	9.25	12.4	77	60
N ₂ O	0.17	3.03	3.0	12.89	0.58	96	77
CH ₄	0	2.59	0	12.6	2.2	74	71
C ₂ H ₆	0	4.47	0.65	11.5	14.2	90	84
C ₃ H ₈	0.08	6.37	1.5 ^e	11.10	21.4	106	94
n-C ₄ H ₁₀	0.03	8.2	2.0 ^e	10.63	31.0	113	102
C ₂ H ₄	0	4.25	1.50	10.50	22.5	91	82
C ₂ H ₂	0	3.93	3.0	11.4	22.2	95	82
NH ₃	1.47	2.26	1.0	10.2	36.6	130	77
H ₂ O	1.85	1.45	0.13	12.6	9.6	137	77
CH ₃ COCH ₃	2.88	6.39	3.4 ^e	9.69	29.7	195	111
CO ₂	0	2.91	4.3	13.77	0.5	95	78
He	0	0.21	0	24.59	0.005	34	32
Ar	0	1.64	0	15.76	0.14	65	63
CH(A ² Δ)	0.78 ^e	3.3	2.287 ^e	8.25			

a. Weast R C, Handbook of Chemistry and Physics, 66th Edition, CRC Press Inc., Florida, 1985, p58, p69, p81.

b. Stogrun D E and Stogrun A P, *Mol. Phys.*, 11(1966), 371.

c. 仿照文献[14]估算.

d. Chemical Abstracts, Vol. 110, 68159d, (1989).

e. Lie G C and Hinze J, *J. Chem. Phys.*, 57(1972), 625.

f. Chen Congxiang et al., *Chem. Phys. Lett.*, 197(1992), 286.

(1)在两种计算方法下,所有的碰撞络合物 CH^{*}-M 的分解几率 p 值可分为三组:在最大取

向时,CS₂有较大的 p 值,为0.36;对有机分子(CH₂Cl₂,CHCl₃,CCl₄,C₂H₂,C₂H₄,C₂H₆,C₃H₈,C₄H₁₀,CH₃COCH₃,cyclo-C₆H₁₂等)以及NO和NH₃, p 值为0.13—0.31;对于无机小分子(H₂O,CO,O₂,CO₂,H₂,N₂O,N₂,Ar,He)以及CH₄, p 值为 1.5×10^{-4} —0.08;用取向平均方法,对CS₂和NH₃分子, p 值为0.4左右;对有机分子及NO分子, p 值为0.12—0.33;对无机小分子及CH₄, p 值为 1.6×10^{-4} —0.12.

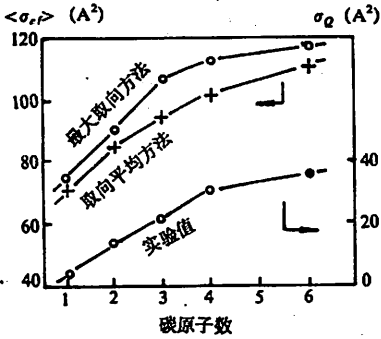


图1 碰撞伙伴烷烃分子中碳原子数对 σ_Q 和 $\langle \sigma_e \rangle$ 的影响

两种算法中,取向平均的计算值比最大取向法的计算值小2—84 Å². 当碰撞伙伴分子具有较大的偶极矩或四极矩时,两种算法的差别较大. 用取向平均计算的结果要更合适些.

作为例子,我们观察了烷烃分子对CH(A²Δ)的猝灭截面. 随着烷烃分子中碳原子数增加,猝灭截面增加,但这种增加趋势逐渐减小: 计算结果与实验结果定性符合得很好,以取向平均方法计算的结果符合得更好些. 现将这种关系示于图1.

(2)在取向平均下,我们计算了 $\langle \sigma_{ef} \rangle$ 随温度 T 的变化关系. 对所有的碰撞伙伴分子, $\langle \sigma_{ef} \rangle$ 随温度 T 的升高而单调地下降,而且若以 $\ln \langle \sigma_{ef} \rangle$ 对 $T^{-1/3}$ 作图,在300—1000K和1000—3000K 这两个温度区间内, $\ln \langle \sigma_{ef} \rangle$ 都与 $T^{-1/3}$ 成线性关系,只是斜率略有不同. 图2是6个碰撞伙伴分子的 $\ln \langle \sigma_{ef} \rangle$ 对 $T^{-1/3}$ 关系图.

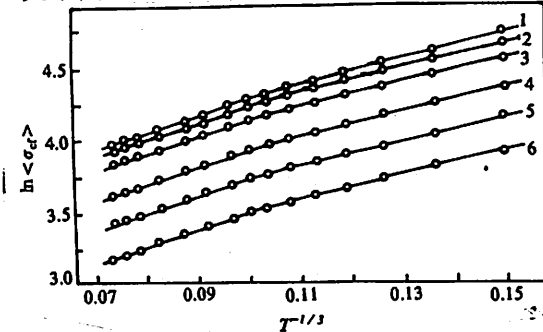


图2 $\ln \langle \sigma_{ef} \rangle$ 对 $T^{-1/3}$ 关系图
1 CHCl₃; 2 CS₂; 3 C₃H₈; 4 N₂O; 5 Ar; 6 He

对于CH(A²Δ)的电子态猝灭速率常数随温度的变化关系,实验研究还很少. 最近,Kenner 等人在低温区一个不大的温度范围内,研究了CH(A²Δ)与10种碰撞伙伴分子的电子态猝灭速率常数与温度的变化关系(240—420K)^[9],发现对H₂,N₂,CO₂和N₂O分子, $E_a > 0$,即温度升高,速率常数增加;对O₂分子, $E_a < 0$;而对其余5种分子CO,C₂H₄,C₂H₆,NH₃和H₂O分子,速率常数无明显变化. 为了

观察碰撞络合物模型预言活化能的适用性,对于上述9种分子,计算了在300—1000K温度区间的猝灭速率常数 k_{cal} ,计算公式用 $k_{cal} = \langle \sigma_{ef} \rangle \bar{v}$, $\langle \sigma_{ef} \rangle$ 为取向平均方法计算的最大猝灭截面, $\bar{v} = (8kT/\pi\mu)^{1/2}$ 为平均相对速度,式中 μ 为折合质量. 然后再用 Arrhenius 公式拟合出活化能,记为计算值 E_c . 与实验值 E_e ,一并列表3.

表3 计算值 E_c 与实验值 E_e 对比(单位为 kJ·mol⁻¹)

	H ₂	N ₂	CO ₂	CO	C ₂ H ₆	O ₂	N ₂ O	NH ₃	H ₂ O
E_c (计算值)	0.705	0.691	0.627	0.659	0.710	0.710	0.663	0.449	0.296
E_e (实验值)	5.7±0.3	10.2±0.4	8.9±2.0	0±2	0.7±1.0	-1.1±0.6	3.4±2.4	0.5±0.9	0.3±2.0

计算所得碰撞猝灭速率常数 $k_{计算值}$ 随温度 T 升高而缓慢地上升, E_c (计算值) 普遍较小,都在

0~1kJ·mol⁻¹之间,而且相差甚微.虽然碰撞络合物模型预言的 CO , C_2H_6 , NH_3 和 H_2O 猝灭 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 的活化能与实验值符合得较好,但这是偶然的. $E_a(\text{计算值})$ 没有反映出各个碰撞伴侣分子的不同性质.

此外,如前所述,用碰撞络合物模型计算某些分子对 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 自由基猝灭截面得到的几率常数 p 偏小. Holtermann 等人^[18]用该模型计算 SO_2 猝灭过程得到 p 值都在1左右. Copeland^[14]计算 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 猝灭过程的 p 值,对有机分子为1左右,对无机分子为0.5左右.

上述二方面问题可能是由于碰撞络合物形成过程中体系的势能面形状产生的. Vegiri 等人^[12]用从头算方法计算了 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+) + \text{CO}$ 和 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta) + \text{H}_2$ 这两种碰撞体系的势能面. 前一种体系不存在位垒,而后一种存在一个早期位垒(0.15eV)和一个晚期位垒(0.6eV),较好地解释了 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 被 H_2 猝灭截面随温度升高先升后下降的关系. 因此,可以预计, $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 与某些碰撞伴侣分子碰撞过程的势能面上可能存在位垒. 在低温区域,位垒阻碍碰撞络合物的形成. 而碰撞络合物模型中,除离心位垒外,未考虑其它位垒,所以计算得到的 p 值偏小,且不能很好地预言截面随温度的变化关系. 在高温区时,体系的平均初始平动能高于位垒,形成碰撞络合物时这一低位垒影响相对较小,碰撞络合物模型的适用性较好. 例如,实验测得300K时, $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 被 NH_3 猝灭截面为 36.6 \AA^2 ^[1], 而1300K时,截面为 23 \AA^2 ^[20], 几率因子由300K时的0.47变为1300K时的0.53,截面正比于 $T^{-1/3}$. 另一个高温实验数据为2100K时氧原子对 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 的猝灭截面为 $32 \pm 24 \text{ \AA}^2$, p 值约为1. 由这些例子可初步得出结论,在从低温到高温大的温度区间内,用碰撞络合物模型计算猝灭截面随温度的变化趋势是适用的,但需要更多的实验数据来验证.

4 结论

本文用碰撞络合物模型,分别在最大取向和取向平均时计算了23种分子对 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 自由基的电子态猝灭截面(300K),其中以取向平均计算的结果较好. 并在取向平均下计算了截面与温度的关系. 碰撞络合物模型对于 $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ 的电子态猝灭过程,在低温区,形成络合物过程中无位垒(除离心位垒外)的体系结果较好,否则不能正确预言猝灭截面与温度的关系;但在一大温度区间内,特别在高温区,适用性会好些,但还得用更多的高温下的实验数据来验证.

参 考 文 献

- [1] Heinrich P, Kenner R D, Stuhl F, *Chem. Phys. Lett.*, 147(1988), No. 6, 573.
- [2] Wagal S S, Carrington T, Filseth S V and Sdowski C W, *Chem. Phys.*, 69(1982), 61.
- [3] Nokes C J, Donovan R J, *Chem. Phys.*, 90(1984), No1-2, 167.
- [4] Lin M C, *J. Phys. Chem.* 77(1973), No. 23, 2726.
- [5] Lin M C, *Int. J. Chem. Kinet.*, 6(1974), No. 1, 1.
- [6] Berman M R, Lin M C, *Chem. Phys.*, 82(1983), No. 3, 435.
- [7] Butler J E, Fleming J W, *Chem. Phys.*, 56(1981), No. 3, 355.
- [8] Crosley D R, *J. Phys. Chem.*, 93(1989), 6273.
- [9] Kenner R D, Pfannenbergs S, Heinrich P and Stuhl F, *J. Phys. Chem.*, 95(1991), 6585.

- [10] Brooks B R, Schaefer H F, *J. Chem. Phys.*, **67**(1977), No. 11, 5146.
- [11] Gosavi R K, Safarik I, Strausz O P, *Can. J. Chem.*, **63**(1984), 1689.
- [12] Vegiri A, Farantos S C, *Chem. Phys. Lett.*, **167**(1990), 278.
- [13] Fairchild P W, Smith G P, Crosley D R, *J. Chem. Phys.*, **79**(1983), 1795.
- [14] Copeland R A, Dyer M J, Crosley D R, *J. Chem. Phys.*, **82**(1985), No. 9, 4022.
- [15] Hirschfelder J V, Curtis C F, Bird R B, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley London, 1954, 26.
- [16] 徐翠薇, 计算方法引论, 高等教育出版社, 1985, 117.
- [17] Lie G C, Hinze J, *J. Chem. Phys.*, **57**(1972), No. 2, 625.
- [18] Holtermann D L, Lee K C, *J. Chem. Phys.*, **77**(1982), No. 11, 5327.
- [19] Cool T A, Tjossem P J H, *Chem. Phys. Lett.*, **111**(1984), 82.
- [20] Carland N L, Crosbey D R, *Chem. Phys. Lett.*, **134**(1987), No. 2, 189.

Calculation of Collisional Quenching Cross Sections of $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ by Some Molecules Using Collisional Complex Model

Yu Zhonghua Chen Congxiang Chen Rongrong

(Department of Modern Chemistry)

Abstract

According to the collisional complex model, the calculations of quenching cross sections of $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ radical by 23 molecules are presented by using most favorable orientation and orientational average methods. In addition, the range of application of the collisional complex model for calculating quenching cross sections of electronically excited species is discussed. In low temperature region, if there is no barrier other than the centrifugal, the calculated result is favorable; otherwise, the dependence of cross section on temperature cannot be correctly predicted. In the wide temperature range, particularly in the high temperature region, the calculation is somewhat more applicable.

Key words: $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$, quenching cross section, collisional complex model

小幅振动旋成体跨音速绕流的数值分析*

陆夕云 夏南 庄礼贤

(近代力学系)

摘 要

假设绕小幅振动旋成体所导致的物理量的变化为平均定常扰动量的高阶小量,那么将物理量(速度、密度及压力)摄动展开后代入 Euler 方程,便导出了前两阶摄动量的控制方程和相应的边界条件,用 TVD 格式进行数值求解,得到了平均定常跨音速流(零阶)和基频(一阶)非定常分量的数值解。

关键词: 小幅振动旋成体, 数值计算, 跨音速流, 非定常流

中图法分类号: O241.82, O354.2

1 引言

跨音速非定常流动是一类很复杂的流动现象,同时与颤振、抖振和动稳定性等实际问题又有着直接的联系。对这一问题的研究早期主要采用近似的线性理论,其实用范围很有限。后来,大都利用数值计算的方法,但总的说来,旋成体的跨音速非定常流的研究工作开展得不多。Stahara 等^[1]和 Liu 等^[2]给出过旋成体绕流的解析解;程健宇和庄礼贤^[3]也研究过相应问题的核函数法。在这些方法中他们均作了局部线性化假设,不能有效地处理带有内伏振动激波的非定常跨音速绕流问题。

本文针对小幅振动旋成体绕流问题,将物理量展成各阶谐振动分量的 Fourier 级数,代入 Euler 方程,由此导出了 Euler 方程的前两阶的摄动形式及相应的边界条件,并用 TVD 格式进行了数值求解,得出了平均定常跨音速流(零阶)和基频(一阶)非定常分量的数值解。计算结果表明,本文给出的方法对求解小幅振动旋成体绕流问题是行之有效的。

2 控制方程

这里采用柱坐标系 (z, r, ψ) 下的 Euler 方程来计算振动旋成体的绕流问题(参见图1),其形式为

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E(Q)}{\partial z} + \frac{\partial F(Q)}{\partial r} + \frac{\partial G(Q)}{r \partial \psi} = H(Q) \tag{1}$$

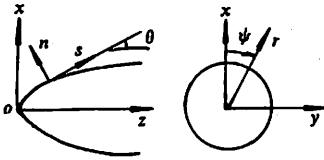


图1 坐标变换示意图

这里

$$Q^T = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho e]$$

$$E(Q)^T = [\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, \rho uw, \rho ue + pu]$$

$$F(Q)^T = [\rho v, \rho vu, \rho v^2 + p, \rho vw, \rho ve + pv]$$

$$G(Q)^T = [\rho w, \rho wu, \rho wv, \rho w^2 + p, \rho we + pw]$$

$$H(Q)^T = -\frac{1}{r} [\rho v, \rho vu, \rho(v+w), 2\rho vw, \rho ve + pv]$$

其中 $e = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2)$, $\gamma = 1.4$, (u, v, w) 为对应于坐标 (z, r, ψ) 方向上的速度分量, p, ρ 分别表示压力和密度.

假设绕小幅振动旋成体的非定常扰动为平均定常流扰动的高阶小量,因而有展开式

$$R(z, r, \psi, t) = R_0(z, r, \psi) + \epsilon R_1(z, r, \psi) e^{ikt} + \epsilon^2 R_2(z, r, \psi) e^{2ikt} + \dots \tag{2}$$

这里, k 为折合频率; R 分别表示物理量 u, v, w, ρ, p 的扰动函数; ϵ 为无量纲振幅; R_0, R_1, R_2 分别表示 R 的零阶、一阶和二阶摄动量.

这里仅考虑平均定常流为轴对称流动的情形,因而在(2)式中的前两阶摄动量可以进一步写成:

$$R_0(z, r, \psi) = \bar{R}_0(z, r) \tag{3a}$$

$$R_1(z, r, \psi) = \bar{R}_1(z, r) (c_1 \cos \psi + c_2 \sin \psi) \tag{3b}$$

其中 c_1, c_2 定义为:当 R_1 表示物理量 u, v, p, ρ 时,取 $c_1 = 1, c_2 = 0$; 当 R_1 表示 w 时,取 $c_1 = 0, c_2 = 1$. 同时 \bar{R}_i 又可分成实部和虚部两部分,

$$\bar{R}_1(z, r) = \bar{R}_{1r}(z, r) + i \bar{R}_{1i}(z, r) \tag{4}$$

下标 r, i 分别表示实部和虚部.

为有效地嵌入边界条件,将柱坐标系 (z, r, ψ) 下的方程变换成贴体坐标系 (s, n, ϕ) 下的方程,其变换关系(参见图1)为

$$\begin{cases} z = \int \cos \theta ds - n \sin \theta \\ r = \int \sin \theta ds + n \cos \theta \\ \phi = \psi \end{cases} \tag{5}$$

将(2)、(3)及(4)式代入方程(1),并根据(5)式将方程变换到贴体坐标系下,略去二阶以上的高阶小量,就可以得到贴体坐标系下的零阶及一阶摄动形式的方程:

(i) 零阶方程

$$\frac{\partial R_0}{\partial s} + \frac{\partial F_0}{\partial n} = H_0 \tag{6}$$

这里,

$$E_0^I = J^{-1}[\rho_0 U_0, \rho_0 u_0 U_0 + \frac{\partial s}{\partial z} p_0, \rho_0 v_0 U_0 + \frac{\partial s}{\partial r} p_0, (\rho_0 e_0 + p_0) U_0]$$

$$F_0^I = J^{-1}[\rho_0 V_0, \rho_0 u_0 V_0 + \frac{\partial n}{\partial z} p_0, \rho_0 v_0 V_0 + \frac{\partial n}{\partial r} p_0, (\rho_0 e_0 + p_0) V_0]$$

$$H_0^I = -J^{-1}/r[\rho_0 v_0, \rho_0 u_0 v_0, \rho_0 v_0^2, (\rho_0 e_0 + p_0) v_0]$$

其中 $J^{-1} = \frac{\partial(z, r, \psi)}{\partial(s, n, \psi)}$ 为变换的 Jacobian 式;

$$U_0 = \frac{\partial s}{\partial z} u_0 + \frac{\partial s}{\partial r} v_0, V_0 = \frac{\partial n}{\partial z} u_0 + \frac{\partial n}{\partial r} v_0; e_0 = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{1}{2}(u_0^2 + v_0^2), \gamma = 1.4$$

(ii) 一阶方程

一阶方程由两部分组成,即实部和虚部,可以写成统一形式:

$$\frac{\partial E_1}{\partial s} + \frac{\partial F_1}{\partial n} = H_1 \quad (7)$$

这里,

$$E_1^I = J^{-1}[\rho_{1j} U_0 + \rho_0 u_{1j}, (\rho_0 u_{1j} + \rho_{1j} u_0) U_0 + \frac{\partial s}{\partial z} p_{1j} + \rho_0 u_0 U_{1j},$$

$$(\rho_0 v_{1j} + \rho_{1j} v_0) U_0 + \frac{\partial s}{\partial r} p_{1j} + \rho_0 v_0 U_{1j}, \rho_0 w_{1j} U_0,$$

$$(\rho_0 e_{1j} + \rho_{1j} e_0 + p_{1j}) U_0 + (\rho_0 e_0 + p_0) U_{1j}]$$

$$F_1^I = J^{-1}[\rho_{1j} V_0 + \rho_0 V_{1j}, (\rho_0 u_{1j} + \rho_{1j} u_0) V_0 + \frac{\partial n}{\partial z} p_{1j} + \rho_0 u_0 V_{1j},$$

$$(\rho_0 v_{1j} + \rho_{1j} v_0) V_0 + \frac{\partial n}{\partial r} p_{1j} + \rho_0 v_0 V_{1j}, \rho_0 w_{1j} V_0,$$

$$(\rho_0 e_{1j} + \rho_{1j} e_0 + p_{1j}) V_0 + (\rho_0 e_0 + p_0) V_{1j}]$$

$$H_1^I = -J^{-1}/r[\rho_0 w_{1j} + \rho_0 v_{1j} + \rho_{1j} v_0 + \lambda k r \rho_{1m},$$

$$\rho_0 u_0 w_{1j} + \rho_0 u_0 v_{1j} + \rho_0 u_{1j} v_0 + \rho_{1j} u_0 v_0 + \lambda k r (\rho_0 u_{1m} + \rho_{1m} u_0),$$

$$\rho_0 v_0 w_{1j} + 2\rho_0 v_0 v_{1j} + \rho_{1j} v_0^2 + \lambda k r (\rho_0 v_{1m} + \rho_{1m} v_0),$$

$$-p_{1j} + 2\rho_0 v_0 w_{1j} + \lambda k r \rho_0 w_{1m},$$

$$(\rho_0 v_0 e_{1j} + \rho_0 v_{1j} e_0 + \rho_{1j} v_0 e_0) + (p_0 v_{1j} + p_{1j} v_0)$$

$$+ (\rho_0 e_0 w_{1j} + p_0 w_{1j}) + \lambda k r (\rho_0 e_{1m} + \rho_{1m} e_0)]$$

其中

$$U_{1j} = \frac{\partial s}{\partial z} u_{1j} + \frac{\partial s}{\partial r} v_{1j}, V_{1j} = \frac{\partial n}{\partial z} u_{1j} + \frac{\partial n}{\partial r} v_{1j}$$

$$e_{1j} = \frac{1}{\gamma - 1} \left(\frac{p_{1j}}{\rho_0} - \frac{p_0 \rho_{1j}}{\rho_0^2} \right) + u_0 u_{1j} + v_0 v_{1j}, \gamma = 1.4$$

上式中下标 j, m 及常数 λ 分别定义为:当(7)式表示实部方程组时,下标 j, m 分别表示 r, i , 并取 $\lambda = -1$; 当(7)式表示虚部方程组时,下标 j, m 分别表示 i, r , 并取 $\lambda = 1$.

3 边界条件

设贴体坐标系下,物面方程

$$B = n - n_b(s, t) = 0 \quad (8)$$

则物面条件可为

$$\frac{DB}{Dt} = 0 \quad (9)$$

上式还可进一步写成

$$-\frac{\partial n_b}{\partial t} - (U_0 + \varepsilon U_1 e^{i\omega t} \cos\psi) \frac{\partial n_b}{q \partial s} + (V_0 + \varepsilon V_1 e^{i\omega t} \cos\psi) = 0$$

其中 $q = 1 - \frac{d\theta}{ds} n$, ε 为俯仰振动的俯仰角或浮沉振动的振幅. ε 及 n_b 均为一阶量级, 因而上式可分成零阶及一阶部分:

$$\text{零阶边界条件} \quad V_0 = 0$$

$$\text{一阶边界条件} \quad -\frac{\partial n_b}{\partial t} - \varepsilon U_0 \frac{\partial n_b}{q \partial s} + \varepsilon V_1 e^{i\omega t} \cos\psi = 0$$

对于旋成体作俯仰振动及浮沉振动, 其 n_b 的形式为

$$n_b = -\varepsilon(z - z_0) \cos\theta e^{i\omega t} \cos\psi \text{ (俯仰振动)}$$

其中 z_0 为俯仰轴的位置, ε 为俯仰角.

$$n_b = \varepsilon \cos\theta e^{i\omega t} \cos\psi \text{ (浮沉振动)}$$

其中 ε 表示浮沉振动的振幅.

此外, 物面上的压力采用法向动量方程求解, 在外边界采用沿局部特征线的 Riemann 不变量计算.

4 计算方法

本文采用 Harten 的 TVD 差分格式^[4,5]来求解本问题中的零阶方程及一阶方程. 在求解方程组(6)、(7)时, 引入时间相关项, 其形式为

$$\frac{\partial Q_l}{\partial t} + \frac{\partial F_l(Q_l)}{\partial s} + \frac{F_l(Q_l)}{\Delta t} = H_l(Q_l) \quad l = 0, 1 \quad (10)$$

这里

$$Q_0^i = J^{-1}[\rho_0, \rho_0 u_0, \rho_0 v_0, \rho_0 e_0]$$

$$Q_1^i = J^{-1}[\rho_{1j}, \rho_0 u_{1j} + \rho_{1j} u_0, \rho_0 v_{1j} + \rho_{1j} v_0, \rho_0 w_{1j}, \rho_0 e_{1j} + \rho_{1j} e_0]$$

$F_l(Q_l), H_l(Q_l)$ 在 $l=0, 1$ 时分别与方程组(6)、(7)中的表述相同.

容易证明, 一阶方程为变系数的线性方程组, 其系数的 Jacobian 矩阵由零阶量构成, 所以一阶方程的差分格式的特性完全由零阶量决定. 在求解过程中分两步进行, 首先采用 TVD 格式计算零阶方程(6); 然后, 对于一阶方程仍采用 TVD 格式进行求解, 由于一阶方程组的实部和虚部是相互耦合的, 所以是联立求解.

根据零阶及一阶方程的计算结果, 可以直接计算出物体表面的零阶及一阶压力系数

$$C_p = C_{p0} + \varepsilon C_{p1} \cos\psi \quad (11)$$

$$C_{p1} = C_{p1r} + i C_{p1i}$$

$$C_{p0} = \frac{p_0 - p_\infty}{\frac{1}{2} \rho_\infty U_\infty^2} = \frac{2}{\gamma M_\infty^2} (p_0 - 1)$$

$$C_{p1r} = \frac{2p_{1r}}{\gamma M_\infty^2}, C_{p1i} = \frac{2p_{1i}}{\gamma M_\infty^2}$$

这里下标 ∞ 表示远场来流参数.

5 计算结果及讨论

本文计算了小幅振动球头柱的跨音速绕流问题. 为具有一般性, 这里俯仰振动及浮沉振动的振幅均取为1.

5.1 零阶计算结果

图2中仅给出了 $M_\infty=0.9$ 时物面的压力分布, 与实验结果^[6]比较是基本吻合的. 由于本文采用了具有高分辨的 TVD 格式进行数值求解, 因而能较好地捕捉流场中的内伏激波.

5.2 一阶计算结果

(i) 浮沉振动

在图3中给出了 M_∞ 分别为 0.8, 0.9 及 0.95 物体作浮沉振动时物面的一阶压力系数的变化规律. 计算结果表明, 不同的来流马赫数, 激波前部流场中物面上压力分布的实部及虚部有着显著的不同. 激波附近, 由于激波的影响, 使得物面上一阶压力分布及非定常位相角的变化更为剧烈,

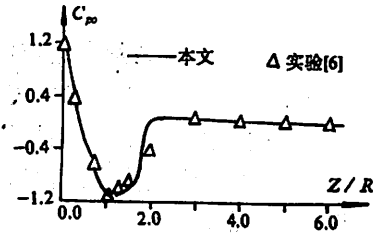


图2 物面上零阶压力系数分布 ($M_\infty=0.9$)

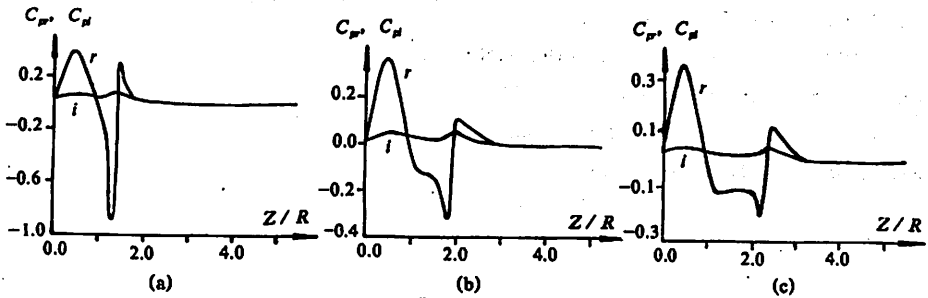


图3 浮沉振动时物面上的一阶压力系数分布 ($k=0.1$)
(a) $M_\infty=0.8$; (b) $M_\infty=0.9$; (c) $M_\infty=0.95$

(ii) 俯仰振动

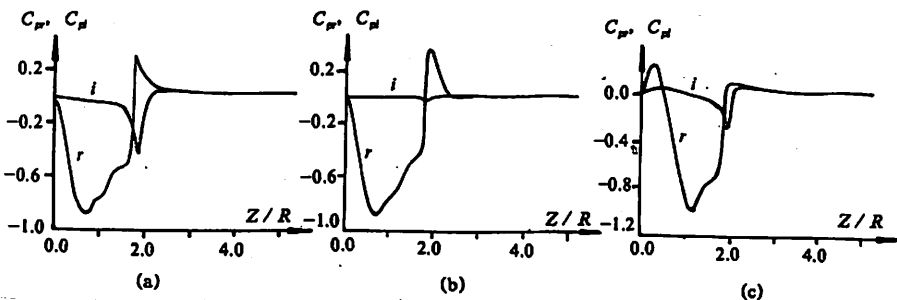


图4 俯仰振动时物面上的一阶压力系数分布 ($M_\infty=0.9$)
(a) $k=0.1, z_0=0$; (b) $k=0.01, z_0=0$; (c) $k=0.1, z_0=2.0$

在图4中给出几个不同参数下俯仰振动的计算结果. 比较图4a、4b, 可以看出, 当 k 很小时 ($k=0.01$) 计算结果趋于准定常, 一阶压力系数的虚部几乎不变(趋于零). 由图4a及4c的一阶压力系数的分布知道, 由于俯仰轴的变化, 一阶压力系数的实部发生了较大的变化.

此外, 用本文的方法还计算了浮沉振动和俯仰振动相互耦合的问题, 使得一阶压力分布变得更为复杂.

6 结束语

本文针对小幅振动旋成体问题, 假设振动所诱导的非定常量为平均定常量的高阶小量, 对 Euler 方程进行摄动, 导出了前两阶摄动量的控制方程及相应的边界条件, 并采用 TVD 格式进行数值求解. 本文的方法不仅排除了一些线性方法及近似方法所带来的局限性, 而且克服了直接求解三维问题计算量大的困难. 这表明这一方法对计算小扰动假设下的旋成体非定常压力分布、跨音速动导数及跨音速气动弹性稳定性导数等问题将是行之有效的.

本文工作得到童秉纲教授及尹协远教授的关心和指导, 特此致谢.

参 考 文 献

- [1] Stahara S S & Sprieter J R, *AIAA J.*, 14(1976), 1402.
- [2] Liu D D *et al.*, *AIAA J.*, 15(1977), 966.
- [3] 程健宇、庄礼贤, *空气动力学学报*, 3 (1985), No. 4, 45.
- [4] Harten A, *J. Comput. Phys.*, 49(1983), 357.
- [5] Yee H C *et al.*, *J. Comput. Phys.*, 57(1985), 327.
- [6] Hsieh T, *AIAA J.*, 16(1978), 1271.

Numerical Analysis of Transonic Flow Around Oscillating Bodies of Revolution With Small Amplitudes

Lu Xiyun Xia Nan Zhuang Lixian

(Department of Modern Mechanics)

Abstract

The unsteady transonic flow around an oscillating body of revolution with a small amplitude is numerically simulated by using the Euler equations and TVD scheme. In the present study, suppose the variations induced by the oscillating body are the higher order small terms than the steady flow ones, then the dominating equations and boundary conditions are given from the pertured expansion of the Euler equations. The present method is examined here for the first time.

Key words: oscillating body of revolution with a small amplitude, numerical method, transonic flow, unsteady flow

正交设计法在无火焰 AAS 中的应用

张 巽 高卫民 陶先刚 王振杰

(地球和空间科学系)

摘 要

以无火焰 AAS 法测定岩石中 Sr 含量试验为例,采用正交设计法选定各种因素的最佳参数. 本文做了三次正交设计,进行了44次试验. 通过直观分析、方差分析、判断因素变化趋势、估计误差和用数理统计的方法处理数据,选择出最佳测试条件. 这一方法省时有效.

关键词: 无火焰原子吸收,正交设计,最佳测试条件

中图法分类号: O212.6

1 前言

数理统计方法是进行科学的试验设计,提高分析工作质量和效率的一个强有力的数学工具. 近年来在分析化学领域广泛应用^[1-3]. 本文旨在将正交设计法应用到无火焰 AAS 法测定 Sr 含量的试验中,对多因素进行正交设计,通过直观分析、方差分析、判断因素变化趋势、估计误差和用数理统计方法处理数据,有效地选择出各种最佳参数,取得了较好的效果.

2 实验部分

2.1 仪器及工作条件

P-E603原子吸收分光光度计, HGA-76型石墨炉, 056型记录仪, PRA-10型打印机, 铯空心阴极灯, 涂钽石墨管.

波长460.7nm, 狭缝(光谱宽度)0.4nm, 灯电流20mA, 烘干阶段升温速率采用 Rate2, 原子化减气, 测定时均使用涂钽石墨管.

2.2 样品及铯标准溶液的制备

本试验选用石榴绢云母片岩(独-4)样品, 该样品经105℃烘干1小时后, 准确称取0.2000

克于聚四氟乙烯坩埚中,以水润湿,加10ml HF、3ml HNO₃、3滴 HClO₄于电热板上加热,样品溶解后蒸发至干,冒尽高氯酸烟,取下稍冷,加少许 HCl,水洗坩埚壁,蒸干,反复一次;加1:1HCl 8ml,加水10ml,微热溶解盐类,移入200ml 容量瓶中,水稀释至刻度,摇匀备用. 溶液浓度为0.075μg/ml. 此样品由标准加入法测定其锶含量为0.0075%^[4].

Sr 标准溶液:用光谱纯 Sr(NO₃)₂配成1mg/ml Sr 贮备液,然后逐级稀释,配制成0.1μg/ml Sr 标准液(1% HCl 底液).

以对 Sr 标准溶液的吸光度值和样品的已知浓度为考核指标.

3 正交试验及其结果

3.1 第一次正交试验

对测定的各种参数通过正交试验优选,在所有因素中,一次性地将最显著因素及较显著因素挑选出,再进行正交试验优选.

试验采用 L₂₇(3¹³)正交表,即13种因素,3水平. 因素有仪器的测试条件、抑制剂 La³⁺、Al³⁺的用量、溶液的酸度以及误差项等. 因素水平见表1,结果见表2,直观分析见图1,方差分析见表3.

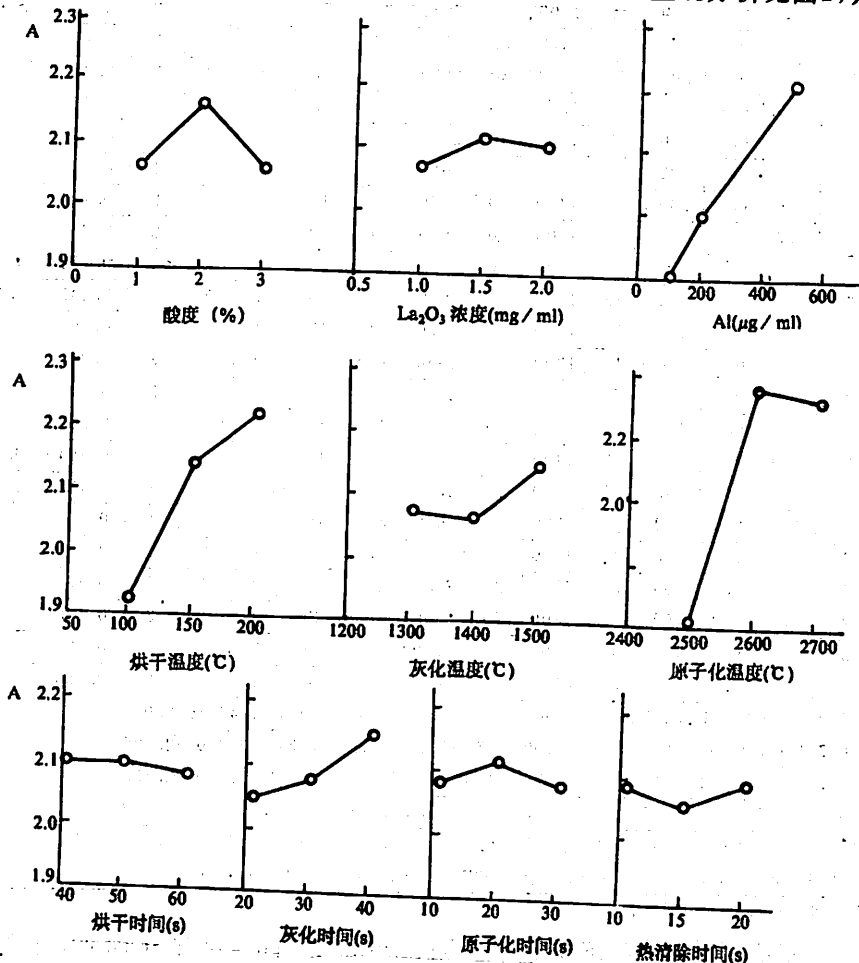


图1 因素与指标的关系

A 为吸光度,以正交试验表中的 k 值为纵坐标,各因素为横坐标.

表1 因素水平(温度℃,时间s)

水平	酸度 % (HCl)	La ₂ O ₃ (mg/ml)	Al ³⁺ (μg/ml)	干燥		灰化		原子化		热清除
				温度	时间	温度	时间	温度	时间	时间
1	1	1.0	600	150	60	1400	20	2650	30	20
2	3	1.5	200	100	40	1500	30	2600	10	15
3	2	2.0	100	200	50	1300	40	2500	20	10

表2 第一次正交试验(温度℃,时间s)

L₂₇(3¹³)

试验号	酸度 (%)	La ₂ O ₃	Al ³⁺	干燥		灰化		原子化		热清除	误差			标准 吸光度	样品 吸光度	样品浓度 (mg/ml)
		mg/ml			温度	时间	温度	时间	温度		时间					
1	1	1.0	0.6	150	60	1400	20	2650	30	20	1	1	1	0.311	0.230	0.074
2	1	1.0	0.6	150	40	1500	30	2600	10	15	2	2	2	0.243	0.207	0.085
3	1	1.0	0.6	150	50	1300	40	2500	20	10	3	3	3	0.211	0.160	0.076
4	1	1.5	0.2	100	60	1400	20	2600	10	15	3	3	3	0.199	0.147	0.074
5	1	1.5	0.2	100	40	1500	30	2500	20	10	1	1	1	0.175	0.130	0.074
6	1	1.5	0.2	100	50	1300	40	2650	30	20	2	2	2	0.263	0.189	0.072
7	1	2.0	0.1	200	60	1400	20	2500	20	10	2	2	2	0.150	0.114	0.076
8	1	2.0	0.1	200	40	1500	30	2650	30	20	3	3	3	0.286	0.215	0.075
9	1	2.0	0.1	200	50	1300	40	2600	10	15	1	1	1	0.231	0.188	0.081
10	3	1.0	0.2	200	60	1500	40	2650	10	10	1	2	3	0.307	0.253	0.082
11	3	1.0	0.2	200	40	1300	20	2600	20	20	2	3	1	0.225	0.195	0.087
12	3	1.0	0.2	200	50	1400	30	2500	30	15	3	1	2	0.186	0.158	0.085
13	3	1.5	0.1	150	60	1500	40	2600	20	20	3	1	2	0.243	0.181	0.074
14	3	1.5	0.1	150	40	1300	20	2500	30	15	1	2	3	0.154	0.125	0.081
15	3	1.5	0.1	150	50	1400	30	2650	10	10	2	3	1	0.247	0.183	0.079
16	3	2.0	0.6	100	60	1500	40	2500	30	15	2	3	1	0.169	0.137	0.081
17	3	2.0	0.6	100	40	1300	20	2650	10	10	3	1	2	0.285	0.234	0.082
18	3	2.0	0.6	100	50	1400	30	2600	20	20	1	2	3	0.241	0.188	0.078
19	2	1.0	0.1	100	60	1300	30	2650	20	15	1	3	2	0.256	0.225	0.088
20	2	1.0	0.1	100	40	1400	40	2600	30	10	2	1	3	0.204	0.171	0.081
21	2	1.0	0.1	100	50	1500	20	2500	10	20	3	2	1	0.133	0.097	0.073
22	2	1.5	0.6	200	60	1300	30	2600	30	10	3	2	1	0.255	0.201	0.079
23	2	1.5	0.6	200	40	1400	40	2500	10	20	1	3	2	0.243	0.173	0.071
24	2	1.5	0.6	200	50	1500	20	2650	20	15	2	1	3	0.338	0.254	0.075
25	2	2.0	0.2	150	60	1300	30	2500	10	20	2	1	3	0.195	0.156	0.080
26	2	2.0	0.2	150	40	1400	40	2650	20	15	3	2	1	0.287	0.241	0.084
27	2	2.0	0.2	150	50	1500	20	2600	30	10	1	3	2	0.256	0.182	0.071
标准	k ₁	2.069	2.076	2.296	2.147	2.085	2.068	2.051	2.317	2.084	2.140	2.174	2.168	2.033		
	k ₂	2.057	2.117	2.093	1.925	2.102	2.150	2.084	2.360	2.083	2.063	2.034	2.032	1.125		
	k ₃	2.167	2.100	1.904	2.221	2.106	2.075	2.158	1.616	2.126	2.090	2.085	2.092	2.135		
样品	k ₁	1.580	1.696	1.784	1.665	1.644	1.605	1.578	1.835	1.608	1.624	1.694	1.702	1.602		
	k ₂	1.654	1.583	1.651	1.518	1.691	1.656	1.663	1.849	1.638	1.682	1.606	1.615	1.663		
	k ₃	1.700	1.655	1.499	1.751	1.599	1.673	1.693	1.250	1.688	1.628	1.634	1.617	1.669		

*表示每列同一水平吸光度之和。

以样品测定值与已知样品浓度值(0.075μg/ml)最接近的,及对Sr标准溶液的吸光度值较大为指标,选出较优水平。第一次正交试验结果表明应选实验号8与24的条件,因其准确度及

灵敏度都高。

表3 L₂₇(3¹³)正交表的方差分析

方差来源	偏差平方和		自由度	平均偏差平方和		F _比		显著性		
	标准	样品		标准	样品	标准	样品	标准	样品	
酸度	0.001	0.0009	2	0.001	0.0005	1.50	1.93			
La ₂ O ₃	0.000	0.0008	2	0.000	0.0004	0.00	1.71			
Al ³⁺	0.008	0.0046	2	0.004	0.0023	12.0	9.86	++	+	
干燥	温度	0.005	0.0031	2	0.003	0.0016	7.50	6.64	+	+
	时间	0.000	0.0005	2	0.000	0.0003	0.00	1.07		
灰化	温度	0.000	0.0003	2	0.000	0.0002	0.00	0.64		
	时间	0.000	0.0008	2	0.000	0.0004	0.00	1.71		
原子化	温度	0.039	0.0260	2	0.020	0.0130	58.5	55.7	++	++
	时间	0.000	0.0004	2	0.000	0.0002	0.00	0.86		
热消除时间	0.000	0.0003	2	0.000	0.0002	0.00	0.64			
误差	0.002	0.0014	6	3×10 ⁻⁴	0.0002					

* 临界值 F_{0.10}(2,6)=3.46, F_{0.05}(2,6)=5.14, F_{0.01}(2,6)=10.90

由方差分析(表3)及直观分析(图1),所给出的各因素变化趋势判断,在所选定的范围内, Al³⁺的用量及原子化温度为最显著因素,干燥温度为较显著因素,其它均为次要因素。

3.2 第二次正交试验

其特点是选出仪器最佳测试参数,在第一次正交试验的基础上,进一步对程序控制器四个阶段上的各参数继续优选,为此选用 L₈(2⁷)正交表,做进一步考察,试验结果见表4,方差分析见表5。

表4 第二次正交试验 L₈(2⁷)

试验号	干燥		灰化		原子化		误差	标准吸光度	样品吸光度	样品浓度 (μg/ml)
	温度	时间	温度	时间	温度	时间				
1	250	50	1300	50	2650	25	2	0.322	0.240	0.075
2	200	50	1500	50	2600	25	1	0.256	0.180	0.072
3	250	40	1500	50	2650	20	1	0.294	0.235	0.080
4	200	40	1300	50	2600	20	2	0.220	0.176	0.080
5	250	50	1500	40	2600	20	2	0.228	0.185	0.081
6	200	50	1300	40	2650	20	1	0.269	0.215	0.080
7	250	40	1300	40	2600	25	1	0.218	0.194	0.089
8	200	40	1500	40	2650	25	2	0.287	0.205	0.071

由第二次正交试验结果表明选用实验号1的条件,又经方差分析(表5)可看出原子化温度仍为较显著因素,且高温实验效果好,但因受仪器最高温度的限制,故只能选用2650℃。

表5 $L_8(2^7)$ 正交表的方差分析

方差来源	偏差平方和		自由度	平均偏差平方和		$F_{比}$		显著性		
	标准	样品		标准	样品	标准	样品	标准	样品	
干燥	温度	0.0001	0.0007	1	0.0001	0.0007	1.00	7.00		
	时间	0.0004	0.0001	1	0.0004	0.0001	4.00	1.00		
灰化	温度	0.0002	0.0001	1	0.0002	0.0001	2.00	1.00		
	时间	0.0010	0.0002	1	0.0010	0.0005	10.0	2.00		
原子化	温度	0.0078	0.0031	1	0.0078	0.0031	78.0	31.00	+	
	时间	0.0007	0.0001	1	0.0007	0.0001	7.00	0.30		
误差	0.0001	0.0001	1	0.0001	0.0001					

* 临界值 $F_{0.10}(1,1)=39.9, F_{0.05}(1,1)=161, F_{0.01}(1,1)=4052$

3.3 第三次正交试验

其特点是确定 La^{3+} 、 Al^{3+} 的最佳用量。由第一次正交试验得出 Al^{3+} 的用量是较显著因素，在仪器测试参数已选定的情况下，做进一步考察。采用 $L_9(3^1)$ 正交表，试验结果见表6，方差分析见表7。

表6 第三次正交试验 $L_9(3^1)$

试验号	La_2O_3 (mg/ml)	Al^{3+} (mg/ml)	误差		标准 吸光度	样品 吸光度	样品浓度 ($\mu g/ml$)
1	0.5	0.2	1	1	0.186	0.163	0.088
2	0.5	0.6	2	2	0.214	0.171	0.080
3	0.5	1.0	3	3	0.202	0.167	0.080
4	2.0	0.2	2	3	0.194	0.146	0.075
5	2.0	0.6	3	1	0.216	0.161	0.075
6	2.0	1.0	1	2	0.255	0.170	0.067
7	4.0	0.2	3	2	0.187	0.153	0.082
8	4.0	0.6	1	3	0.305	0.159	0.078
9	4.0	1.0	2	1	0.208	0.166	0.080

表7 $L_9(3^1)$ 正交表的方差分析

方差来源	偏差平方和		自由度	平均偏差平方和		$F_{比}$		显著性	
	标准	样品		标准	样品	标准	样品	标准	样品
La_2O_3	0.0009	0.00008	2	0.0005	0.00004	3.00	0.73		
Al^{3+}	0.0017	0.00024	2	0.0009	0.00012	3.78	2.18		
误差	0.0009	0.00022	4	0.0002	0.00006				

* 临界值 $F_{0.10}(2,4)=4.32, F_{0.05}(2,4)=6.94, F_{0.01}(2,4)=18.00$

由第三次正交试验结果(表6)可选出4号、5号试验条件为抑制剂最佳用量。由方差分析(表7)可以看出 La_2O_3 、 Al^{3+} 的用量在所选范围内均属次要因素。

4 结果与讨论

(1)由以上三次正交试验结果选定最佳参数见表8,这与文献[4]报道的略有不同,显然这是因素交互作用的结果.

表 8 测试参数选择对比

	酸度 (%)	La ₂ O ₃ mg/ml	Al ³⁺ mg/ml	干燥		灰化		原子化		热清除	
				温度	时间	温度	时间	温度	时间	温度	时间
文献[4]	1	1.5	0.2	150	60	1400	30	2650	10	2650	10
本文	2	2	0.2	250	50	1500	20	2650	20	2650	15

(2)用正交设计法选定的各参数对岩石样78-15-9及 G-3进行了测定,并与单因素选择法测定的结果进行了比较见表9,其结果完全一致,表明本试验所选用各参数是可行的.

表 9 样品中 Sr 含量测定结果比较

样号	测得 Sr 浓度 (μg/ml)		样品中 Sr 含量% (本试验)	样品中 Sr 含量% (单因素测定)
	78-15-9	0.072	0.072	0.036
G-3	0.045	0.042	0.006	0.006

(3)表中所有测定值均按4d法舍去可疑值后的三次平均值,其余全部落在99.7%置信界内.

(4)测定过程中,还必须考虑石墨管随着使用次数的增加吸光度逐渐下降的影响,加以校正^[5].这是必须进行的一个关键技术试验中均用校正后的数据进行比较.

(5)用正交设计法选择最佳参数,具有独特的优点.它能考虑到各因素间的交互作用,这是单因素试验所不及的.它省时省力,能用最少的实验次数选出最优水平.本工作做了三次正交设计,共进行了44次试验,即得到最佳测试参数.若用单因素优选进行同样工作,则需做2275次试验.

参 考 文 献

- [1] 中国科学院数学研究所统计组,常用数理统计方法,科学出版社,1979:34.
- [2] 郑用熙,分析化学中的数理统计方法,科学出版社,1986:180.
- [3] 邓勃,数理统计方法在分析测试中的应用,化学工业出版社,1984:257.
- [4] 林树道等,中国科学技术大学学报,11(1981),No. 4,93.
- [5] 张巽、高卫民,岩矿测试,待发表.

Application of Orthogonal Design in Graphite Furnace Atomic Absorbtion

Zhang Xun Gao Weimin Tao Xiangang Wang Zhenjie

(Department of Earth and Space Sciences)

Abstract

The optimum parameters are seleted by means of orthogonal design for determination of Sr concentration in rock samples by flame-free AAS.

44 measurements in 3 sets of orthogonally designed experiments were performed with good results. In addition, variation trends caused by different factors and uncertainties can be evaluated by direct analysis and variance analysis, data can be processed by mathematical statistics in orthogonal design. Therefore, the results are more reliable. This paper is a good beginning of the application of orthogonal design in different fields.

Key words: graphite furnace atomic absorbtion, orthogonal design, optimum measurement conditions

雄兔背部皮下埋植慢释放雄激素药物的实验

刘瑞芝 李希明⁺ 雷少琼 陈文明⁺
单春华 董勇治⁺ 韩 萍⁺ 赵 钢 郑 力

(生物系) (+应用化学系)

摘 要

将具有慢释放丙酸睾丸甾酮(testosterone propinete (TSP))的聚合物,即雄激素药物,植入摘除了双侧睾丸的雄兔背部皮下定期取血,测定其在体内外的释放水平. 利用血球计数和组织切片等方法观测植入雄激素药物后兔子的健康状况. 结果表明:雄激素药物在动物体内能长期、稳定地释放丙酸睾丸甾酮. 实验结果与雄激素药物埋植于雄兔阴囊部位的实验结果作了对照分析. 这一工作为雄激素药物多种形式的临床应用提供了依据.

关键词:雄激素药物,丙酸睾丸甾酮,动物实验

中图法分类号:Q579.11, R318.08

1 引言

采用烯类单体低温辐射聚合的方法制成的雄激素药物,含有40%丙酸睾丸甾酮,呈卵状,具有在动物体内完全不分解、亲水性好、在体液中缓慢稳定释放丙酸睾丸甾酮的特点^[1]. 雄激素药物在动物体内的实验研究对治疗雄激素分泌不足等疾病具有重要的临床应用价值^[2]. 日本吉田、嘉悦等人利用低温辐射聚合技术固定甲基睾丸甾酮,制备了人造睾丸^[3]. 我们曾进行过将雄激素药物埋植在雄兔阴囊部位的实验研究^[4]. 本文则将雄激素药物埋植在阉割过的雄兔背部皮下,定期取血,测定血清中睾丸甾酮的水平,并利用白血球计数和组织切片观察等方法观测其健康及适应状况. 还将结果与埋植于雄兔阴囊部位的情况进行了对照分析.

2 实验观测

雄激素药物是利用低温辐射聚合技术将雄激素丙酸睾酮、交联剂二甲基丙烯酸乙二醇酯固定在聚甲基丙烯酸β羟乙酯载体上制成的。其长径为17mm,短径为5mm,重约0.5g,内含40%的丙酸睾酮,呈乳白色,表面光洁。由于聚合物载体亲水性好,它在动物体内完全不解,因而能长期保持原来的形状,并且有一定的柔软性。

将雄激素药物浸泡在pH7.2缓冲溶液中,保持恒温37℃,然后用紫外分光光度法(吸收波长为240nm)测定其丙酸睾酮的释放水平,测试工作持续了100天,以观察其在体外慢释放的稳定性。

在局麻无菌的条件下手术摘除五只长到五个多月性成熟的雄性家兔的两侧睾丸。一个月后,将雄激素药物埋植在家兔背部皮下。

另外五只同样长到五个多月性成熟、阉割过一个月的雄性家兔,在其背部皮下埋植不含雄激素的空白载体,以便实验对照。

将雄兔在摘睾前取血用放射免疫分析法测定其睾丸酮的水平,取其平均值(226±29ng/100ml)作为埋植雄激素药物组的对照值。

摘睾一个月测定血清中睾酮的水平作为埋植雄激素药物前的激素水平。

植入雄激素药物后,定期取血并测定血清中睾酮的水平,取其平均值以便进行对照分析。

对阉割前后及埋植雄激素药物前后的家兔取血计数白血细胞,以观察家兔健康状况。

解剖并取出已埋植半年的雄激素药物及埋植部位周围组织和纤维膜,固定并做成切片,在显微镜下观察并与该部位正常组织切片相比较。

观察摘睾前后及埋植雄激素药物前后家兔的体态表现,生活状态以便进行对照分析。

3 结果与讨论

(1) 体外测试结果

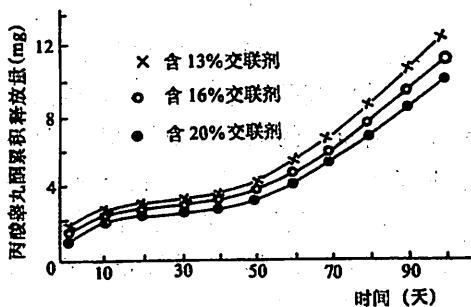


图1 TSP在体外累积释放量与时间的关系

由于丙酸睾酮及其载体具有良好的亲水性,在缓冲液作用下先是雄激素药物溶胀,然后丙酸睾酮自聚合物向外扩散,逐渐释放出来。图1为载体中含三种不同剂量交联剂时,其丙酸睾酮在体外累积释放量随时间的变化规律。由图中发现载体的交联密度随着交联剂的含量加大而增加,网络变密,溶液渗入孔道变细,致使TSP向外扩散的速率变慢。本实验采用含13%的剂量配方,其余二种配方都可以使用。

由体外测试结果表明,丙酸睾酮量占40%的雄激素药物在体外缓冲液中释放了100天,仅消耗总量的4.7%,说明雄激素药物可以长期稳定地释放丙酸睾酮。

(2)进行了体内 TSP 水平的测试

a. 雄激素药物埋植背部后血清中 TSP 水平

高峰值 $628 \pm 32 \text{ng}/100 \text{ml}$

平均水平 $252 \pm 28 \text{ng}/100 \text{ml}$

b. 背部埋空白载体前后的睾酮平均水平

摘睾前水平 $229 \pm 21 \text{ng}/100 \text{ml}$

植入空白载体后 $33 \pm 5 \text{ng}/100 \text{ml}$

c. 雄激素药物在家兔背部埋植半年后取出,清洗干淨,烘干称重,其平均值为 0.4050g ,平均释放了 23% .

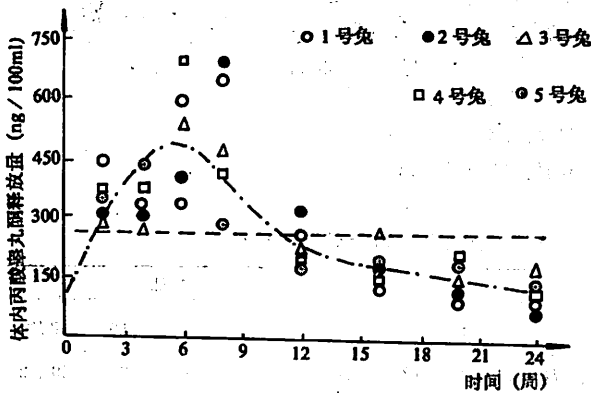


图2 植入雄激素药物后家兔血清中 TSP 水平随时间的变化

-----摘睾前5只家兔血清中平均 TSP 水平
 - - - - -植入雄激素药物后5只家兔血清中 TSP 水平

图2是植入背部皮下雄激素药物的家兔血清中 TSP 水平随时间的变化情况. 从中看出:

①背部植入雄激素药物后家兔血清中的睾酮水平从摘睾后的 $47 \pm \text{ng}/100 \text{ml}$ 迅速回升,第二周后就超过了家兔正常激素水平即 $226 \pm 29 \text{ng}/100 \text{ml}$;第六周开始出现了高峰值,达 $600 - 700 \text{ng}/100 \text{ml}$;第十二周后趋于稳定,即在 $172 \pm 9 \text{ng}/100 \text{ml}$ 范围内波动而略有下降趋势.

②雄激素药物在动物体内的埋植部位对其丙酸睾酮的释放与吸收水平有明显影响. 首先是睾酮水平的高峰值,背部植入仅为埋于阴囊部位的一半^[1]. 另

外,睾酮释放水平趋于稳定的时间,背部植入要比埋于阴囊部位延迟2-4周左右. 最后,背部植入雄激素药物后睾酮的平均水平低于摘睾前的正常水平,而阴囊部位埋入雄激素药物后的睾酮平均水平却高于健康家兔的正常水平. 上述现象的原因就是雄激素药物在背部受到皮下组织的挤压较大,不象阴囊部位那样松软. 另外,背部的微血管远不如阴囊部位丰富. 所有这些均影响了睾酮的释放和吸收.

(3)图3是背部埋植雄激素药物半年后,药物周围组织与正常组织的石蜡切片照片. 从中看出:药物周围的纤维膜比正常组织的纤维膜有所增厚,膜内部微血管有所增多,未发现炎症细胞和其他变化.

(4)表1列出了背部埋植雄激素药物及空白载体后家兔的状况. 白血细胞计数属正常范围,说明没有炎症. 实验观察中,实验家兔的食量、生活状态及体重增加属正常范围,没有不适的表现. 埋植空白载体的家兔体重增加较埋植药物的实验家兔多,是因为空白载体中不含激素的原故.

(5)背部只埋植空白载体时由于空白载体本身并不释放睾酮,因而摘睾后血清中睾酮水平下降趋势没有改变. 但背部埋植雄激素药物后睾酮水平却有明显改变,这说明雄激素药物虽然最好埋植于阴囊部位,但是在不适于埋在阴囊部位的情况,埋植于背部也能发挥一定的作

用. 至于除阴囊外的最佳部位及在不同部位时睾酮的最佳剂量还有待于进一步探索.

总之, 只要适当改变剂量, 雄激素药物埋植于动物背部也能起到长期稳定地释放丙酸睾酮的作用, 这就为雄激素药物的多种形式的临床应用开辟了新的途径.

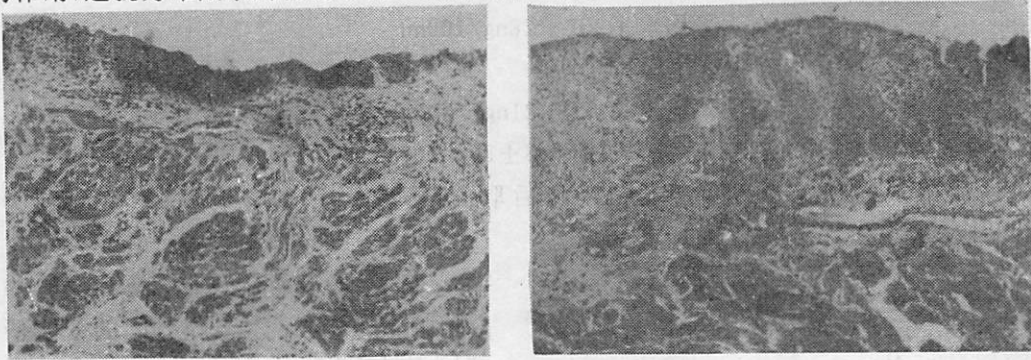


图3 家兔背部皮下组织切片

- a 正常家兔皮下(背部)的膜和肌肉(横切)
b 背部植入雄激素药物的膜和肌肉(横切)

表1 雄兔背部分别植入雄激素药物及空白载体前后的状况比较

项 目	植入雄激素药物						植入空白载体					
	1	2	3	4	5	平均	6	7	8	9	10	平均
摘睾前 TSP 水平	184	250	135	290	270	225±29	180	200	300	240	225	229±21
摘睾后1个月植药与空白载体前 TSP 水平	20	20	88	32	75	47±14	20	55	70	48	25	44±9
植入药物与空白载体半年后平均 TSP 水平	295	299	157	218	292	252±28	32	34	40	22	37	33±5
雄激素药物与空白载体的重量(g)	0.5444	0.5153	0.4816	0.5482	0.5140		0.5012	0.5421	0.4289	0.4904	0.5416	
取出的药物与载体重量(g)	0.4086	0.3461	0.3757	0.4261	0.4686		0.5022	0.5425	0.4290	0.4933	0.5428	
家兔摘睾前体重(kg)	1.60	1.75	1.70	1.60	1.30		1.50	1.67	1.35	1.65	1.65	
摘睾后1个月植入药物与空白载体前家兔体重(kg)	2.05	1.90	2.00	1.90	1.70		2.05	1.65	2.15	1.85		
植入雄激素及空白载体后2个月家兔体重(kg)	2.30	2.20	2.40	2.20	2.10		2.80	3.00	2.70	3.10	3.20	
健康家兔白细胞计数(个/mm ³)	4400	3780	4267	4783	2400		4233	4350	4267	3817	3850	
植入药物与载体半年白血细胞计数(个/mm ³)	4167	3920	4017	4233	4567		4100	4083	4833	3907	4001	

雄激素药物在制备的同时经射线杀菌, 只要手术操作严格, 不会引起感染, 长期使用机体有无反应, 还有待于进一步研究.

参 考 文 献

- [1] 刘瑞芝等, 辐射研究与辐射工艺学报, 10(1992), No. 2, 65~69.
[2] 李振甲等, 激素的放射免疫分析, 科学出版社, 1985, 373.
[3] Youskida, M, Asano M, Kactus I, *Biomaterial*, 4(1983), No. 33.
[4] 刘瑞芝等, 生物医学工程学杂志, 8(1991), No. 4, 305~308.

Experimental Study of Transplanted Region of Testicular Prosthesis *in vivo*

Liu Ruizhi⁺ Li Ximing Lei Shaoqiong Chen Wenming⁺

Shan Chunhua Dong Yongzhi⁺ Han Ping⁺

Zhao Gang Zheng Li

(Department of Biology)

(⁺Department of Applied Chemistry)

Abstract

The testicular prosthesis with slowly released testosterone propionate is implanted subcutaneously in the back of male rabbits whose testes are excised. Then, at regular intervals, blood is taken and the level of male sex hormone is measured by radioimmunoassay. The measurement results show that the testicular prosthesis has a stable release of male sex hormone in a long period *in vivo*. In addition, these results are compared with those obtained by transplanting testicular prosthesis into the scrotum of castrated rabbits. This will provide the scientific basis for clinical application of testicular prosthesis on various occasions.

Key words: testicular prosthesis, testosterone propionate, animal test

烟气顶蓬射流非稳态温度场的分析计算

袁理明 霍然 陈莉

(工程热物理系)

摘 要

在综合分析烟气顶蓬射流特性的基础上,利用速度场分布不随时间变化的实验结果,计算了顶蓬射流的非稳态温度场,并与参考文献的实验结果进行了比较.其计算方法简单可行,结果合理.这一结果对火灾探测器和水喷淋器的安装设计具有一定的指导意义.

关键词:室内火灾,火灾探测,顶蓬射流,温度分布

中图法分类号:TK121

1 引言

建筑物发生火灾时,通常会产生大量的烟气,热烟气在浮力的作用下,以羽流的形式竖直上升,撞击到建筑物顶蓬后便形成了与顶蓬平行的顶蓬射流.任何火灾的发展过程中,火灾的早期探测和扑救对避免人员伤亡和减少物质损失都是很重要的.弄清顶蓬射流形成、发展的规律,可以正确指导火灾的早期探测和扑灭.国外有不少学者开展了这方面的研究工作.Zukoski等人较早研究了顶蓬射流中热气体与顶蓬的换热过程^[1];美国国家火灾研究中心的Cooper把“墙射流”(Wall Jet)的理论应用到顶蓬射流中,得到了顶蓬射流速度分布的理论解^[2];Marks等人用互相关测速仪(cross-correlation velometry)测量了不同高度顶蓬射流的速度分布^[3],发现顶蓬射流的速度分布不受顶蓬换热过程的影响,即不随时间变化. Beyler也得出了相同的结论^[4].本文将此结论用于计算顶蓬射流的非稳态温度分布,不再需要求解动量方程就能使原来求解温度场的复杂计算大为简化,且计算结果合理.由于大多数火灾探测器和灭火设施都工作在顶蓬射流区域,因此计算结果对于建筑防火安全设计具有一定的指导意义.

2 顶蓬射流的特性

2.1 特征参数

顶蓬射流是一种边界层类型的流动,描述顶蓬射流的特征厚度有两个参数 δ 和 L 。定义

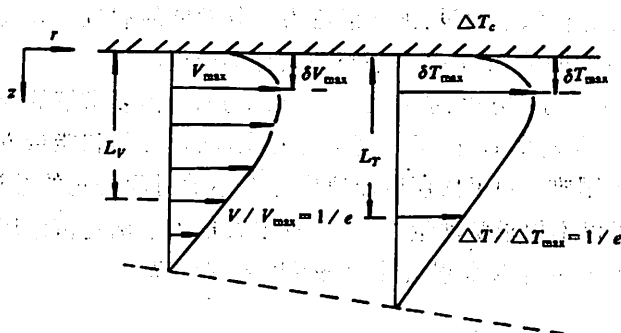


图1 顶蓬射流及其特征参数

δV_{max} 为烟气流动速度最大值处与顶蓬的距离, δT_{max} 为烟气温度最大值处与顶蓬的距离,分别称为动量边界层厚度和热边界层厚度。二者的实际意义在于确定感烟探测器和感温探测器的最佳安装位置。在超出 δV_{max} 和 δT_{max} 的区域,流动可以视为自由射流,这个区域的动量特征厚度和热特征厚度分别用 L_v 和 L_T 表示。

当 $z = L_v$ 时, $V/V_{max} = 1/e$; 当 $z = L_T$ 时, $\Delta T/\Delta T_{max} = 1/e$; 式中 $\Delta T = T - T_0$, T_0 为环境温度,如图1所示。设 r 为离开烟气羽流中心线的径向距离,一些研究表明, δV_{max} 和 δT_{max} 仅是 r 的函数,并有下面的经验公式^[3]:

$$\begin{aligned} \delta V_{max} &= 0.0187r^{0.668} & 0.26 \leq r/H \leq 1 \\ \delta T_{max} &= 0.152r^{1.35} & 0.26 \leq r/H \leq 1 \end{aligned}$$

L_T 和 L_v 的经验关系式^[3]: $L_T/H = 0.012[1 - e^{-2.24(r/H)}]$, $0.26 \leq r/H \leq 1$; $L_v/H = 0.205[1 - e^{-1.75(r/H)}]$, $0.26 \leq r/H \leq 1$ 。

式中 H 为顶蓬距地面的高度。在相同的 r 处, $L_v > L_T$, 比值在 1.6~1.9 之间。

2.2 最大速度和最高温度

顶蓬射流中的速度与温度分布可用下面的表达式描述^[2]:

$$V^* = V/Q^{1/3}(g/H)^{1/2} = f(r/H)$$

$$\Delta T^* = \Delta T/Q^{2/3}T_{\infty} = f(r/H)$$

式中 $Q^* = (1 - \lambda)Q/\rho_{\infty}C_p T_{\infty} g^{1/2} H^{5/2}$, Q 是热源的功率, λ 是辐射散热占总发热量的份额数, C_p 为定压比热, ρ_{∞} 为空气的密度, g 为重力加速度。

顶蓬射流最大速度与最高温度的关系式如下^[3]:

$$\begin{aligned} V_{max}^* &= 0.01415(r/H)^{-2} + 0.427(r/H)^{-1} + 0.281 \\ \Delta T_{max}^* &= 0.166(r/H)^{-2} + 1.2(r/H)^{-1} + 2.0 \end{aligned} \quad (1)$$

2.3 速度分布

顶蓬射流的速度分布不随时间变化,有如下的表达式^[3]:

$$V/V_{max} = 1.59(z/L_v)^{0.14} e^{[1.817(z/L_v)^2]} \quad (2)$$

3 速度场计算的物理模型和数值方法

3.1 物理模型

顶蓬射流具有下面几个特征:二维轴对称流动(z 方向和 r 方向),强湍流,非等温流动,温度的变化导致密度变化.由此,为简化计算作如下假设:顶蓬射流为充分发展的湍流边界层流动;流动为准静态;没有热源和任何形式的功;流动为常压;忽略热气体的辐射.

顶蓬射流满足的基本方程为连续方程、动量方程、能量方程和状态方程.需要求解的未知量是 r 方向速度 V , z 方向速度 W ,温度 T 和密度 ρ .由于密度 ρ 的变化,动量方程和能量方程互相耦合,计算过程十分复杂,收敛也很困难.利用顶蓬射流速度分布不随时间变化的结论,直接采用速度分布的经验公式(2),就可以不用求解动量方程,并省去大量用于确定雷诺应力和湍流流动特征的经验常数,这样大大地简化了顶蓬射流非稳态温度场的计算.

(i) 能量方程

由于顶蓬射流为准静态流动,烟气可视为理想气体,且有 $V^2 \gg W^2$,利用能量守恒可得:

$$\left[\frac{\partial}{\partial r} (\rho V C_r T_r) \right] + \left[\frac{\partial}{\partial z} (\rho W C_z T) \right] r = \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(K \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right] r + \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] r$$

其中 K 为导热系数.上式右边第一项的数量级是1,可以略去该项,原式则变为

$$C_r \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial r} (\rho V T_r) \right] + \left[\frac{\partial}{\partial z} (\rho W T) \right] r \right\} = r \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right]$$

(ii) 连续方程

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho V r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho W) = 0$$

将上式代入能量方程,能量方程简化为

$$\rho V \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right) + \rho W \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{K}{C_r} \frac{\partial T}{\partial z} \right)$$

连续方程简化为

$$\frac{1}{r} (\rho V) + \frac{\partial}{\partial r} (\rho V) + \frac{\partial (\rho W)}{\partial z} = 0$$

(iii) 状态方程

$$\rho = P/RT$$

由于顶蓬射流中存在因温度变化而引起的密度变化,因此采用法夫雷(Favre)平均处理湍脉动.上述三个方程经处理后分别为

$$\bar{\rho} \bar{V} \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} + \bar{\rho} \bar{W} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varphi \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \right) \quad (3)$$

式中 $\varphi = \mu_{eff}/Pr_{eff}$.

$$\frac{1}{r} (\bar{\rho} \bar{V}) + \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{V}) + \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{W})}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

$$\bar{\rho} = \frac{\bar{P}}{R\bar{T}} \quad (\bar{P} = P) \quad (5)$$

式中上标“~”表示法夫雷平均,“-”表示时间平均.

湍流涡团粘性系数 μ_{eff} 采用普朗特混合长度假设:

$$\mu_{eff} = \rho L^2 \left| \frac{\partial V}{\partial z} \right|$$

$$L = C_t, \quad 0 \leq z \leq \lambda \delta / C_t$$

$$L = \lambda \delta, \quad z \geq \lambda \delta / C_t$$

其中 δ 是顶蓬射流的动量特征厚度 L_v , 对于边界层类型流动, 取 $C_t = 0.8, \lambda = 0.1$.

3.2 数值方法

(i) 网格划分

考虑到靠近顶蓬处存在很薄的热边界层和动量边界层, 因此靠近顶蓬处网格划分较细, 远离顶蓬网格划分比较粗. r 方向网格均匀分布, 计算区域的左边界为 $r = r_0$, 是羽流撞击区的外边界, 即 $r/H = 0.26$ 处. z 方向从顶蓬开始, 下边界为 $(r/H)_{max}$ 处动量边界层厚度的4倍.

(ii) 初始条件和边界条件

速度 V 的分布由(2)式给出, 初始的温度场由顶蓬射流最高温度分布式(1)和温度的高斯分布假设确定:

$$\Delta T_{initial}(r, z) = \Delta T_{max}(r) e^{-(z/L_r)^2}$$

初始的气体密度由上式和状态方程算出. μ_{eff} 由混合长度模型算得, 并作为整个计算区域的初始值.

边界条件为 $z = 0: V = 0, T = T_c; r = r_0: V$ 已知, T 和进入撞击区的羽流温度相同; $z = h = 4\delta V_{max} / (r/H)_{max}; T = T_\infty$, 顶蓬温度 T_c 在每个时间步长内作为常量处理, 由顶蓬的热平衡方程算出; 撞击区的羽流温度由经验公式给出.

4 结果和讨论

4.1 计算结果

(i) 不同时刻的温度分布

图2是顶蓬射流开始后1分钟和5分钟两个时刻的温度分布. 从图中可以看出, 随着 r/H 值

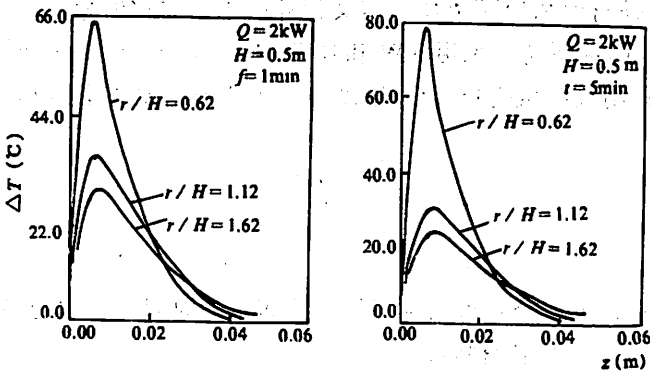


图2 顶蓬射流不同位置处的温度分布

的增大, 顶蓬射流最高温度的位置远离顶蓬, 这主要是由于热边界层增厚造成的. 值得注意的

是在温度曲线的前一段边界层流动部分,同一 z 值处,随 r/H 增大,温度降低.而在温度曲线后一段自由射流部分,同一 z 值处,随 r/H 增大,温度反而升高.

(ii)不同位置的温度分布

图3是两个不同位置处,顶蓬射流温度分布随时间的变化.随着时间增加,顶蓬射流最高温度的数值增大,最高温度的位置向顶蓬靠近,即 δT_{\max} 随时间减小,这与文献[3]的实验结果一致.计算结果还表明 L_r 基本上不随时间变化.

(iii)不同高度的温度分布

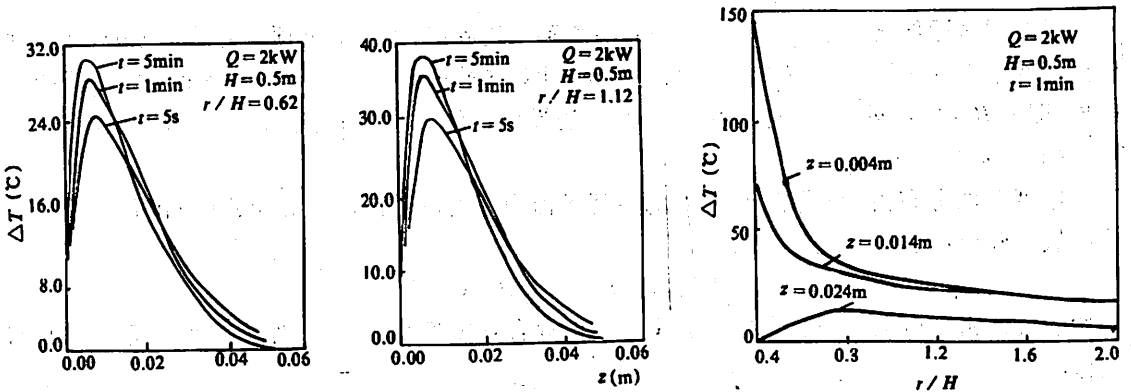


图3 顶蓬射流不同时刻的温度分布

图4 顶蓬射流不同距离处的温度分布

图4是距离顶蓬三个不同高度处,顶蓬射流温度随 r 的变化.可以发现,靠近顶蓬处,随 r/H 增大,温度曲线急剧下降.这是因为射流速度大,卷吸的冷空气多,与顶蓬的换热速率也较大.在同一 r/H 处,随着与顶蓬距离的稍有增大,温度数值也下降很多,这主要是由于卷吸冷空气冷却的缘故. $z = 0.024\text{m}$ 的温度曲线的前一段已不是热气流的温度,而是环境空气的温度.随 r/H 增大,边界层增厚,才逐渐进入顶蓬射流区域.

4.2 计算与实验结果的比较

由于条件所限,未能做出相应的实验加以比较.只将计算值与文献[3]中的实验结果作了比较.实验中采用的顶蓬材料和顶蓬半径与本文计算中采用的数值相同,实验采用了两种不同的顶蓬高度 1m 和 0.5m ,热源功率采用 2kW 和 1kW . $H = 0.5\text{m}$, $Q = 2\text{kW}$ 时的实验结果与本文的计算值符合较好,最高温度相差 $4\sim 5^\circ\text{C}$,温度边界层特征厚度误差小于 15% .自由射流部分在下部区域差别增大.

5 结语

(1)顶蓬射流的非稳态温度分布可以利用速度分布不随时间变化的经验公式方便地进行计算.计算值与有关的实验结果符合较好.

(2)顶蓬射流最高温度值随 r/H 的增大而减小,其位置逐渐远离顶蓬.在自由射流部分,同一 z 值处,温度随 r/H 的增大而升高.

(3)顶蓬射流最高温度的位置随时间增加向顶蓬移动, L_r 的数值基本上不随时间变化,说

明自由射流部分受顶蓬传热影响很小。

(4)在竖直方向,顶蓬射流的初始段由于卷吸冷空气的缘故,温度急剧下降。

参 考 文 献

- [1] Zukoski E E and Veldman C C, An Experimental Investigation of the Heat Transfer from a Buoyant Gas Plume to a Horizontal Ceiling, NBS-GCR-77-97, May, 1975.
- [2] Cooper L Y, Ceiling Jet-Driven Wall Flows in Compartment Fires, NBSIR 87-3535, April, 1987.
- [3] Marks H C and Motevalli V, Charactering the Unconfined Ceiling Jet, Proceeding of the 3th International Symposium on Fire Satety Science, Edinburgh, 1990, 301-312.
- [4] Beyler C L, Fire Plumes and Ceiling Jets, *Fire Safety J.*, 1986, No. 11, 53-75.

Computation of Unsteady Temperature Field of Smoke Ceiling Jet

Yuan Liming Huo Ran Chen Li

(Department of Engiaecring Thermophysics)

Abstract

Based on the analysis the behavior the behavior of smoke ceiling jet, computation of unsteady temperature field of smoke ceiling jet is perfomed according to the experimental results that velocity distribution does not vary with time. Compared with other experimental results, the computation method is simple, and the results are reasonable. It is of importance to fire detector design and sprinkler installation.

Key words: compartment fire, fire detector, ceiling jet, temperature distribution

智能式自动逻辑综合系统 KDLS

何中礼 庄镇泉

(电子技术基础部)

摘 要

本文介绍一种智能式逻辑综合系统 KDLS. 它以寄存器传输语言(RTL)作为输入, 采用基于知识的方法进行电路的结构设计、模块综合和电路的逻辑优化. 对电路的延时优化问题也作了讨论. KDLS 用 C 语言和人工智能语言 ops5⁺ 写成, 迄今含有 150 多条规则. 应用系统进行实例综合, 取得了令人满意的结果.

关键词: 结构设计, 逻辑综合, 逻辑优化

中图法分类号: TN47

1 引言

逻辑综合的任务是从系统的行为描述出发, 根据一系列的约束和目标集合, 实现满足这些约束和目标的硬件结构描述. 根据给定的行为描述, 可以实现多种不同的结构. 综合的任务之一就是找到一种最好的满足约束的结构^[1].

逻辑综合基本上有变换法、代数法、编译法和专家系统等四种方法^[2]. 随着大规模集成电路的发展, 传统的基于算法的方法已越来越不能解决实际设计问题, 因而用基于专家系统的方法已逐渐引起人们的重视. 近年来已有些逻辑综合专家系统问世. 例如 David 等人研制的 SOCRATES 系统^[3], William 等人研制的 DAS/LOGIC 逻辑设计系统^[4]以及美国 Carnegie-Mellon 大学的 DAA 系统^[5].

逻辑综合的课题仍处于研究阶段, 目前还没有很实用的综合系统问世, 人们致力于采用各种方法进行研究, 以期获得较为实用的逻辑综合工具.

2 KDLS 的系统结构

图1是 KDLS 的系统结构框图。根据 RTL 的行为描述,系统用数据预处理程序将其转换成一种较简单的中间格式并写进动态数据库。KDLS 应用知识库中的各领域知识,根据解释器解释机制(由 ops5+ 提供)对数据库的数据进行电路结构综合和功能块的综合,再对综合出的电路进行局部优化,尽可能地减少电路中冗余的门和连线,最后系统对电路进行延时计算及延时优化。

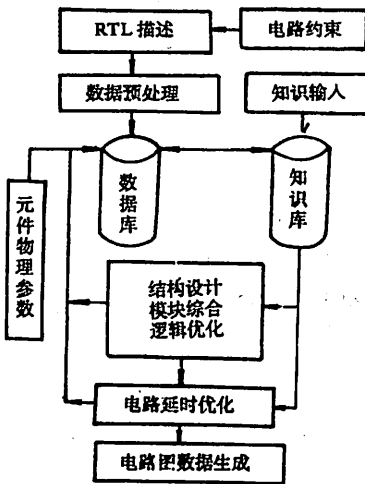


图 1 KDLS 系统的结构

系统的中心部分是动态数据库和知识库。知识库的知识(产生式规则)不断地被满足条件的事例所激活,而每一规则的激活所产生的新的数据又不断地增加到动态数据库中。

2.1 描述语言及其预处理

寄存器传输级描述语言(RTL)是数字系统行为描述语言之一。下面是这种描述语言的一个例子。

<TE>: C0,C1,F0,F1,A,B,D0.

<RE>: REG.

<BE>: |C0| F0=A&B, C1=A+B+D0.

ST : |D0| REC←F0;REG←F1. #

例中包含一个布尔逻辑描述和一个时序逻辑描述。在布尔描述中,当 C0为“1”时将操作“A&B”连接到端子 F0;当 C1为“1”时,将操作“A+B+D0”连接到端子 F1;在时序逻辑描述中,在状态 ST 时,如果 D0为“1”,将布尔变量 F0传送到寄存器 REG;否则将 F1传送到寄存器 REG。

数据预处理是将寄存器级描述语言转换成一种中间格式,它采用 ops5+ 能够接受的属性值单元形式。这种数据格式结构简单,便于方便地转换成各种不同的电路结构。

2.2 动态数据库

在 KDLS 中,动态数据库类似黑板的作用,是用来存放问题、解和中间结果。同时,动态数据库又可以被任何知识源访问,作为一个媒介来联系各个知识源从而实现协调推理。动态数据库主要包括以下内容:

- 数据操作描述单元
- 组合元件描述单元
- 时序元件描述单元
- 组件描述单元
- 时序状态描述单元
- 延时参数描述单元

另外还有路径描述单元及有关中间结果描述单元等,以上各描述单元,用 ops5+ 语言描述如下:

(literalize orgs	(literalize micro-com
att	name
op	input-mun
bit	pin
mark	output
state	body
body	mk)
input)	

a 原数据操作描述单元

```
(literalize micro-trl
name
input
pin
output
mk
contral)
```

b 组合元件描述单元

```
(literalize inlist name in id num)
(literalize outlist name out in id mun)
(literalize otrlist name otrl id num)
```

c 时序元件描述单元

```
(literalize state
current
next
cond
mark)
```

d 组件描述单元

```
(literalize tech
name
input-mun
delay)
```

e 时序状态描述单元

f 延时参数描述单元

2.3 知识库

KDLS 系统的知识库有5个类型的领域知识:电路结构设计知识、电路模块综合知识、电路的逻辑优化知识、路径搜索知识及电路的延时优化知识. 每个类型的知识相当于一个知识源, 每个知识源含有一组特定的领域知识, 现分别介绍如下:

(1) 电路结构设计知识源

用以确定电路的基本结构, 它是由数据预处理后的描述语言直接映射成逻辑结构电路. 由于电路的行为描述到电路的结构描述是一对多的映射关系, 因而这将面临着电路结构的选择问题. 就本系统而言, 电路结构的选择遵循一定的原则, 这些原则用一系列产生式规则来表达, 概括起来, 主要有以下几方面:

- 布尔表达到电路结构的变换知识
- 连接(=)及传输(→)操作的变换知识
- 条件操作的变换知识
- 算术运算及逻辑运算的变换知识

(2) 电路模块的合成知识源

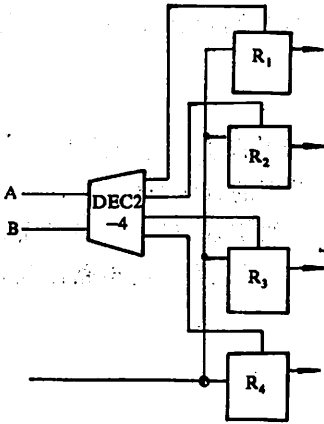


图2 2-4译码器的模块综合

由于在电路结构的设计阶段,很多子电路是从行为描述直接映射得到的,因而使得整个电路结构不紧凑,有必要对各子电路进行适当的组合,形成合理的电路模块,如较常用的各种选择器、译码器等功能块,这就是本系统模块综合的任务。例如对于下面的描述:

$$|!A \& !B| R1 \leftarrow d, |A \& !B| R2 \leftarrow d.$$

$$|!A \& B| R3 \leftarrow d, |A \& B| R4 \leftarrow d.$$

将产生一个2-4译码器模块和寄存器所组成的电路(如图2)。

在KDLS的数据库中,一个功能块用几个单元来表示。例如译码器可用一个输入表单元和一个输出表单元来描述。对于图2的2-4译码器,其描述如下:

```
(inlist name DEC2-4 ^ in A B ^ id <id> ^ mun 2)
```

```
(outlist ^ name DEC2-4 ^ out out1 out2 out3 out4 ^ id <id> ^ mun 4)
```

其中 in, out 分别是输入属性和输出属性, mun 是输入输出端子数属性, 属性 name 的值是功能块的名字, 属性 id 是功能块的标识符, 它表示此功能块与其它同名的功能块具有不同的连接端子。

(3) 电路逻辑优化知识源

由各种综合规则进行综合所得到的电路通常不能达到最优,特别是在一些条件操作和布尔操作中,往往有冗余项存在,因而必须对电路进行优化。KDLS采用局部优化方法,优化知识可以应用在门与门之间、门与功能块之间。图3就是一种较为常见的电路变换,其相应的规则描述如下:

```
(p op-rule12
```

```
(micro-com ^ name nand ^ input-num 2 ^ pin <a> <b> ^ output <out1>)
```

```
(micro-com ^ name nand ^ input-num 2 ^ pin <out1> <b> ^ output <out>)
```

```
→ (remove 1 2)
```

```
(micro-com ^ name inv ^ pin <a> ^ output <out2>)
```

```
(micro-com ^ name nand ^ input-num 2 ^ pin <out2> <b> ^ output <out>))
```

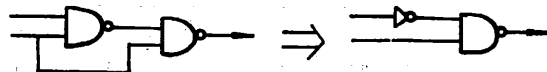


图3 电路的逻辑优化

(4) 路径搜索知识源

为了能进行电路的延时优化,必须对关键路径进行搜索,电路任意两点可能有多条路径,路径的搜索也有多种不同的方法。本系统的搜索采用深度优先的方法。搜索规则是每搜索到

一个新的节点,就将本节点的后续节点记录下来并将新的节点作为起始节点存入动态数据库,同时把此节点增加到当前的路径中去.如果搜索失败,控制将产生回溯,那么就寻找新的路径,直到所有的可能搜索全部完成.

(5) 路径延时优化知识源

如果综合出的电路中,所指定的信号传输路线的时间不满足设计者提出的时间约束,综合器可以对电路延时进行优化.延时优化有多种方法,现将本综合器采用的方法举例如下:

(i)采用更快速度的门实现局部电路:通常逻辑电路可以有不同的实现方法,在保持面积不变的情况下,具有不同的延时效应.例如在CMOS工艺中,利用“与非门”实现的电路比利用“或非门”实现的电路要快,“异或门”比“同或门”的速度要快,如图4的电路变换.

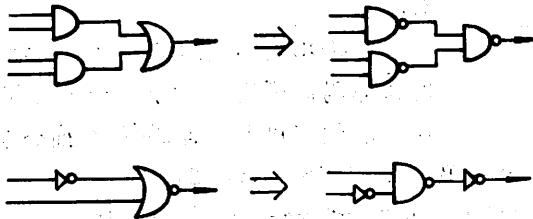


图4 电路变换减少电路延时

(ii)减少电路的级数:通过减少信号传输线路的级数,对改善电路的延时非常有效,通过适当的电路变换可以减少电路的级数.

(iii)减少元件的扇出系数:如果元件有较大的输出负载,可以采用驱动门进行适当的缓冲,或者增加同样的门以减少单一门的输出端子.

以上所列举的各种优化方法都以一系列的规则在指定的关键路径上来实现.

3 实验及系统评价

表1列举了用KDLS进行电路综合的几个实例,分各个不同的设计阶段,列举了电路综合的元件数目(包括宏单元及功能块)、门的总数目以及延时优化前后的电路延时.从表1可以

表1 KDLS的综合实例

电路名	结构综合		模块综合		逻辑优化		延时优化	
	元件数	门总数	元件数	门总数	元件数	门总数	优化前	优化后
电路1	23	72	13	59	18	50	74	62
电路2	13	15	6	10	5	4	21	21
电路3	38	125	22	97	34	81	142	122

看出在结构设计阶段,电路的元件数目和门总数都比较高,在模块设计阶段,电路的元件数和门的总数都大为降低.这表明用一些常用的模块来实现电路使得电路结构紧凑,便于硬件实现.在逻辑优化阶段,由于实现了功能块与门的优化,使得电路的元件数目有所上升,但电路的总门数却反而降低,有利于VLSI的实现.另外,由于进行了延时优化,电路的延时比优化前有所减少,使得电路信号传输加快.

从以上实验结果可以看出:

- (1) 采用基于知识的人工智能方法进行逻辑综合是可行的,效果是良好的.
- (2) 系统采用常用模块来实现电路综合,使得电路结构简单,物理实现容易.
- (3) 系统可以方便地对电路进行转换及延时优化. 例如可以将 AND/OR 电路转换成 NAND/NOR 的形式,使得电路价格更低,速度更快,集成更方便.

参 考 文 献

- [1] Michael C M, Alice C P, Raul C, Tutorial on High-Level Synthesis 25th ACM/DAC, 1988, pp330—336.
- [2] Louise T, An Overview of Logic Synthesis System, 24th ACM/DAC, 1987, pp166—172.
- [3] David G *et al.*, SOCRATES; A System for Automatically Synthesizing and Optimizing Combinational Logic, 23rd ACM/DAC Processings, 1986.
- [4] William P B, Jin H K, DAS/Logic; A Rule-based Logic Design Assistant, Second Conference on Artificial Intelligence Application, 1985, pp264—268.
- [5] Kowalski T J, Thomas D E, The VLSI Design Automatic Assistant; What's in a Knowledge Base, 22nd ACM/DAC 1985, pp252—258.
- [6] Takeshi Yoshnura, Satoshi Goto, A Rule-Based Algorithmic Approach for Logic Synthesis, 23th ACM/DAC, 1986, pp162—165.
- [7] 庄镇泉、戴英侠、王荣生,大规模集成电路计算机辅助设计,中国科技大学出版社,1990, pp32—58.

An Intelligent Automatic Logic Synthesis System KDLS

He Zhongli Zhuang Zhengquan

(Department of Electronic Technology Fundamental)

Abstract

This paper introduces an automatic logic synthesizing system KDLS. The input of the system is RTL (Register Transfer Language), and the knowledgebased method is used to implement the structure design, module synthesis and logic optimization. Timing optimization is also discussed. KDLS is written with C language and artificial intelligent language ops5⁺ and now it has about 150 rules. The results obtained from KDLS are satisfactory.

Key words: structure design, logic synthesis, logic optimization

正电子湮没辐射一维角关联实验 的图示拟合软件

霍剑青 王晓蒲 蒋惠林 张志诚

(基础物理中心)

(近代物理系) (应用化学系)

摘 要

本文介绍了适用于非金属的正电子湮没辐射一维角关联实验谱的图示拟合方法及其在微机 IBM-PC/XT 上实现的软件。软件采用了多高斯组分的数学模型,避免了非线性拟合时必须输入拟合参数初值的困难。拟合过程直观、简单、易于掌握。

关键词: 正电子湮没辐射一维角关联, 高斯组分, 图示拟合, 软件

中图分类号: O571.414

1 引言

正电子湮没辐射一维角关联实验是正电子湮没技术中除寿命谱和多普勒展宽能谱外的一种基本实验手段。它能够直接提供湮没光子对的动量密度分布,这种分布与固体中电子动量分布之间有着确定的关系,即实验所测得的角关联曲线能够反映正电子所探测的电子在动量空间的密度,因此它被用于测量金属、合金中的费米面及研究各种固体材料的电子动量分布和缺陷。与其它传统方法相比较,角关联方法不要求超纯样品、超低温、强磁场等极端条件及微波技术,因此在物理、化学、生物等各个领域得到了广泛的应用。

角关联测量用于材料结构研究时,是通过研究角关联谱中宽、窄组分来实现的。有关角关联解谱软件的研究工作目前国内未见报道。通常采用多普勒展宽能谱的数学处理方法(即求曲线的 H 参数、 W 参数、 S 参数的方法),对角关联曲线进行分析,无法对各组分进行分析。本文采用“应用图示法的正电子寿命谱解谱软件”一文^[1]同样的思路,介绍适用于非金属的图示拟合角关联曲线方法及其在 IBM-PC/XT 微机上的实现的解谱软件。

2 数学模型和原理

软件中对于非金属的角关联曲线采用多高斯组分拟合。

从角关联实验测得的数据为一组 $(\theta_i, N_i), i=1, 2, \dots, n$, 其中 θ_i 是角度, 以毫弧度表示, N_i 是扣除本底后计数。

进行数据拟合的数学模型^[2]是:

$$f(\theta, b) = \sum_{j=1}^{K_c} I_j^c g(\theta - \theta_0, \sigma_j) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{K_s} I_j^s (g(\theta - \theta_0 - \omega_j, \sigma_j) + g(\theta - \theta_0 + \omega_j, \sigma_j)) \quad (1)$$

其中, $f(\theta, b)$ 为拟合函数, b 为拟合参数; K_c, K_s 分别表示中心峰个数和侧峰的对数; $g(\theta, \sigma_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_j} \exp\left[-\frac{\theta^2}{2\sigma_j^2}\right]$; σ_j 与第 j 个高斯组分半高宽 (FWHM) _{j} 的关系为

$$(FWHM)_j = 2(2\ln 2)^{1/2} \sigma_j$$

θ_0 为中心峰位, ω_j 为第 j 对侧峰峰位相对于 θ_0 的距离。 I_j^c, I_j^s 分别表示第 j 个中心峰和第 j 对侧峰的强度。

由(1)式可知, 角关联曲线有如下性质:

(i) 中心峰位于 $\theta = \theta_0$, 第 j 对侧峰峰位分别于 $\theta = \theta_0 + \omega_j$ 和 $\theta = \theta_0 - \omega_j$ 。

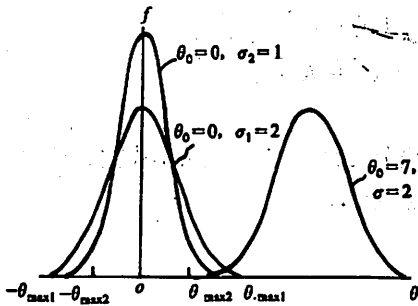


图1 不同参数的角关联曲线

(ii) 当 σ 小时, 角关联曲线陡峭, 曲线呈“瘦型”, 表示该组分中正电子接触高动量电子几率小; 当 σ 大时, 角关联曲线平缓, 曲线呈“胖型”, 表示该组分中正电子接触高动量电子几率大。如图1所示^[3]: 当 $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3 \dots$ 时, $\theta_{\max 1} > \theta_{\max 2} > \theta_{\max 3} \dots$ 。因此, 在角关联曲线中, 取 $\theta > \theta_{\max 2}$ 时, 仅有第一组分的贡献, 若扣除第一组分后, 取 $\theta > \theta_{\max 3}$ 则剩余谱中仅有第二组分的贡献……以此类推, 则可将角关联曲线按各组分逐一拟合。

假设已知第 j 个中心峰组分曲线上两点 P, Q $(\theta_1, N_1), (\theta_2, N_2)$, 该组分曲线的数学模型为

$$f = A_j \exp^{-(\theta - \theta_0)^2 / 2\sigma_j^2} \quad (2)$$

将(2)两边取对数得

$$\ln f = \ln A_j - \frac{1}{2\sigma_j^2} (\theta - \theta_0)^2 \quad (3)$$

将 $(\theta_1, N_1), (\theta_2, N_2)$ 代入(3)得

$$\begin{cases} \ln N_1 = \ln A_j - \frac{1}{2\sigma_j^2} (\theta_1 - \theta_0)^2 \\ \ln N_2 = \ln A_j - \frac{1}{2\sigma_j^2} (\theta_2 - \theta_0)^2 \end{cases} \quad (4)$$

解得

$$2\sigma_j^2 = \frac{(\theta_2 - \theta_0)^2 - (\theta_1 - \theta_0)^2}{\ln N_1 - \ln N_2} \tag{5}$$

$$A_j = \exp\left[\frac{N_1(\theta_2 - \theta_0)^2 - N_2(\theta_1 - \theta_0)^2}{(\theta_2 - \theta_0)^2 - (\theta_1 - \theta_0)^2}\right] \tag{6}$$

同理可求得第 j 对侧峰的参数为

$$2\sigma_j^2 = \frac{(\theta_2 - \theta_0 \pm \omega_j)^2 - (\theta_1 - \theta_0 \pm \omega_j)^2}{\ln N_1 - \ln N_2} \tag{7}$$

$$A_j = \exp\left[\frac{N_1(\theta_2 - \theta_0 \pm \omega_j)^2 - N_2(\theta_1 - \theta_0 \pm \omega_j)^2}{(\theta_2 - \theta_0 \pm \omega_j)^2 - (\theta_1 - \theta_0 \pm \omega_j)^2}\right] \tag{8}$$

归一化后,第 j 个组分的强度为

$$I_j^0 = \frac{\sqrt{2\pi A_j} \sigma_j}{\sum_{j=1}^{K_c} \sqrt{2\pi A_j} \sigma_j + \sum_{j=1}^{K_s} \sqrt{2\pi A_j} \sigma_j} \tag{9}$$

$$I_j^1 = \frac{\sqrt{2\pi A_j} \sigma_j}{\sum_{j=1}^{K_c} \sqrt{2\pi A_j} \sigma_j + \sum_{j=1}^{K_s} \sqrt{2\pi A_j} \sigma_j} \tag{10}$$

拟合的 χ^2 量为

$$\chi^2 = \frac{\sum_{i=1}^M (N(\theta_i) - f(\theta_i, b))^2 \cdot \frac{1}{N(\theta_i)}}{M - 2 \times (K_c + K_s) + 1} \tag{11}$$

其中, M 为实验点的个数.

软件中,固定 θ_0 , 调整 ω_j 及各组分曲线上 P, Q 两点,从宽组分至窄组分逐一拟合,直至满足最小二乘法原理.

3 软件流程

利用上述数学模型,软件以 σ_j 递减方式对各组分进行拟合. 为便于调整各组分的 P, Q 点及 ω_j 值,判断所选取参数的优劣和选择最佳的拟合曲线及拟合参数,软件采用了图示方法,即用屏幕直接显示拟合曲线和拟合结果的方法. 软件流程如图2所示. 软件设有1~6号软件开关,各开关作用如下:

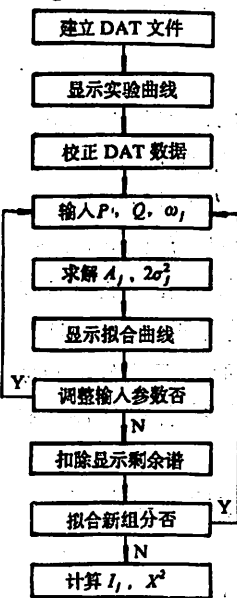


图2 软件流程图

“1”: 键盘输入实验数据.

执行时,每输入一个数据,屏幕显示一个对应点,即一旦数据输入完毕,屏幕将显示完整实验曲线.

“2”: 校正实验数据.

执行时,输入需要校正实验点的序号,屏幕将显示该实验点的数据和位置,经判断有误后可用键盘修改数据.

“3”: 数据存盘,建立 DAT 文件.

“4”：从磁盘调入·DAT文件。

“5”、“6”：拟合开关。

执行“5”时，输入现时最宽组分 P 、 Q 两点的序号及从图示中判断的侧峰峰位 ω_i 后，即进行该组分的拟合。拟合后，屏幕将显示拟合曲线和原实验曲线，很容易判断拟合的优劣和对参数进行调整。

当对现时组分拟合满意后，键盘输入“6”，则执行扣除上述组分，进行新组分的拟合，整个软件的执行可从1~6按顺序执行，也可根据解谱需要自行的确定顺序，操作较方便。

4 石英晶体拟合结果

我们使用中国科学技术大学研制的中国第一台正电子湮没辐射一维角关联实验装置(仪器分辨率 $FWHM=0.45\text{mrad}$ ，测量了石英单晶[100]方向的角关联曲线，应用本文介绍的解谱软件按三组分拟合，拟合结果如下：

组分数	P, Q 位置	$2\sigma^2$	I_j (或 I_j)	峰偏离中心 (mrad)
1	第3、5点	63.88159	0.417318	0.0
2	第12、14点	11.23271	0.4530554	± 4.7
3	第25、27点	2.554365	0.1296266	0.0

拟合 $\chi^2=4.7681$ 。

上述结果与文献[4]中的石英晶体[100]方向正电子湮没辐射特性曲线测峰峰位在离中心 $\pm 4.9\text{mrad}$ 处的结果相近。

软件拟合过程如图3~图9所示。图中横纵轴分别为毫弧度角度和归一后的计数。

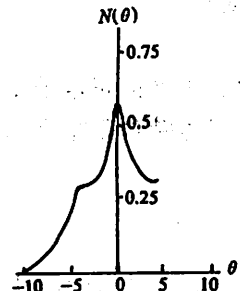
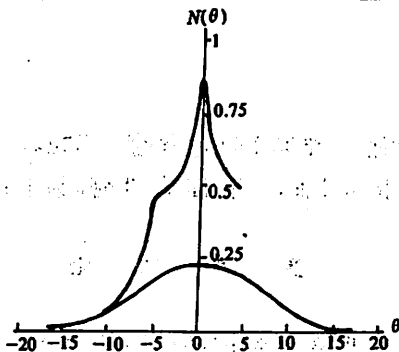
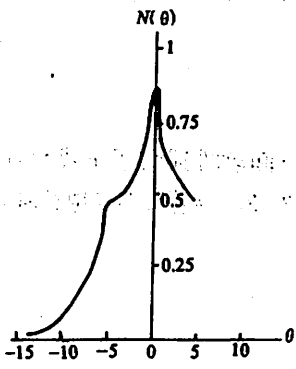


图3 石英[100]扣除本底实验谱

图4 第一组分拟合图

图5 扣除第一组分后的剩余谱

拟合前，屏幕显示样品的角关联实验谱，为方便起见，在本例中取中心峰位 $\theta_0=0$ (如图3所示)。对第一组分拟合时，选取实验谱上第3、5点作为 P 、 Q 点，将其坐标代入(5)、(6)式求解后，屏幕立即显示该组分的拟合曲线(如图4所示)。与实验谱比较后很容易判断该组分拟合的优劣和对 P 、 Q 点进行调整。

第一组分拟合后，从实验谱中扣除第一组分得到剩余谱(如图5所示)。采用与上述类似的

过程即进行新组分的拟合,如图6~图9所示.

分别拟合第二、三组分时,所选取的 P 、 Q 点为实验曲线上的第12、14点和第25、27点.第二组分按对侧峰拟合, $\omega_2 = \pm 4.7\text{mrad}$,第三组分按中心峰拟合, $\omega_3 = 0$.

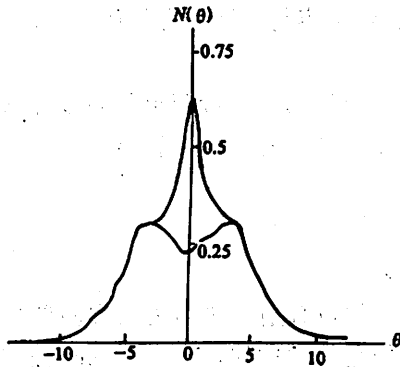


图6 第二组分拟合图

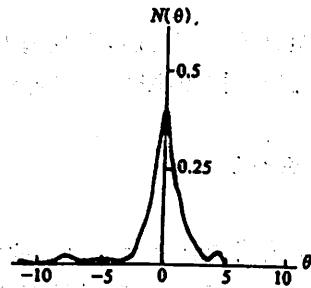


图7 扣除两个组分的剩余谱

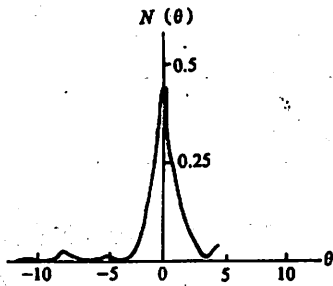


图8 第三组分拟合

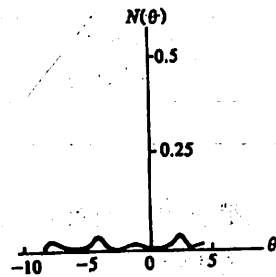


图9 扣除三个组分的剩余谱

5 结束语

本文介绍的正电子湮没辐射一维角关联曲线的图示拟合方法和软件避免了非线性拟合时输入迭代初值的困难,缩短了拟合过程,方法简单、直观,易于掌握,有一定推广应用价值.

参 考 文 献

- [1] 王晓蒲等,中国科学技术大学学报,18(1987年),No. 4,515-519.
- [2] Peter Kirkegaard, *Computer Phys. Comm.*, 23(1981),307-335.
- [3] 李惕碚著,实验的数学处理,科学出版社,北京1980,37~46.
- [4] Coussot G, Paulin R, *J. Appl. Phys.*, 43(1972),No. 4,1325~1330.

Plot Fit Software for Angular Correlation Positron Annihilation Radiation

Huo Jianqing Wang Xiaopu

(Centre for Fundamental Physics)

Jiang Huilin

(Department of Modern Physics)

Zhang Zhicheng

(Department of Application Chemistry)

Abstract

This paper introduces the plot fit methods and the software used on an IBM-PC/XT microcomputer, in which the sums of Gaussians mathematical model are used for nonmetallic systems. The software not only avoid the difficulty of having to input the initial parameters when fitting, but also simplifies the process for solving angular correlation spectrum.

Key words: angular correlation positron annihilation radiation, sums of Gaussians, plot fit, software

Empirical Bayes Test in a Multiple Linear Regression Model

Zhang Shunpu

(Hangzhou Normal College)

Abstract

The purpose of this paper is to investigate the asymptotical optimality and the convergence rates of a sequence of empirical Bayes decision rules for two-action decision problems where the observations belong to the following model $Y = X\beta + \varepsilon$, where $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I)$, σ^2 is unknown. Using X, Y and the information contained in the observation vectors obtained from n independent past samples of the problem, the empirical Bayes testing procedures for $\theta = (\beta', \sigma^2)'$ are exhibited. The testing procedures are compared with the optimal Bayes testing procedure and are shown to be asymptotically optimal with rate near $O(n^{-\frac{1}{2}})$.

Key words: empirical Bayes, multiple linear regression model, asymptotical optimality, convergence rate

AMS Classification (1991): 62C12

1 Introduction

Consider the following linear regression model

$$Y = X\beta + \varepsilon \quad (1)$$

where Y is an $l \times 1$ vector of random observation, X is an $l \times p$ matrix of known constants with $l \geq p + 2$ so that $X'X$ is invertible. β is a $p \times 1$ vector of unknown regression coefficients. $\varepsilon \sim N_l(0, \sigma^2 \cdot I)$, where σ^2 is unknown. Let $\theta = (\beta', \sigma^2)'$. Suppose θ has an unknown and unspecified prior distri-

bution $G(\theta)$ on (θ, B_θ) , B_θ being the Borel field of subsets of θ , the $p+1$ dimensional Euclidean space. The hypothesis to be tested is

$$H_0: b'\theta \leq d \leftrightarrow H_1: b'\theta > d$$

with loss function

$$L_0(\theta, d_0) = \begin{cases} 0, & \text{for } b'\theta \leq d \\ a(b'\theta - d)^2/\sigma^2 & \text{for } b'\theta > d \end{cases} \quad (2)$$

$$L_1(\theta, d_1) = \begin{cases} a(d - b'\theta)^2/\sigma^2 & \text{for } b'\theta \leq d \\ 0 & \text{for } b'\theta > d \end{cases} \quad (3)$$

where d is a constant. $b = (b'_1, b'_{p+1})'$ is a $(p+1) \times 1$ vector of known constants, b_1 is a $p \times 1$ vector, a is a positive constant. $D = \{d_0, d_1\}$ is the decision space. d_0 indicates accepting H_0 , d_1 indicates rejecting H_0

From the knowledge of linear models, we know the least square estimator of β is:

$$\hat{\beta} = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p) = \Sigma X'Y$$

the only minimum variance unbiased estimator (MVUE) of σ^2 is:

$$\hat{\sigma}^2 = \|Y - X\hat{\beta}\|^2 / (l - p)$$

where $\Sigma = (X'X)^{-1}$, $\hat{\beta}$ and $\hat{\sigma}^2$ are independent of each other. Let $Z = (\hat{\beta}', \hat{\sigma}^2)'$, where $\|Y\|^2 = (|y_1|^2 + \dots + |y_l|^2)^{1/2}$, $Y = (y_1, \dots, y_l)'$, then Z is complete and sufficient for $\theta = (\beta', \sigma^2)'$.

In the EB context, suppose we have incurred n independent experiences of the above testing problem in the past. That is we have n independent random variable pairs

$$(Y_1, \beta_1, \sigma_1^2), \dots, (Y_n, \beta_n, \sigma_n^2)$$

from the past experiments, and $(Y_{n+1}, \beta_{n+1}, \sigma_{n+1}^2) \triangleq (Y, \beta, \sigma^2)$ from the present experiment with

$$Y_i = X\beta_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n+1$$

The vectors $Y_i, \beta_i, \varepsilon_i$ behave like Y, β, ε described above. $\theta_i \triangleq (\beta'_i, \sigma_i^2)$, $i = 1, 2, \dots, n+1$ are i. i. d. according to the same unknown prior distribution $G(\theta)$. Let $\hat{\beta}_i$ be the least square estimator of β_i in the i -th experiment that we have in the past, and let $\hat{\sigma}_i^2$ be the MVUE of σ_i^2 . Then

$$\hat{\beta}_i = \Sigma X'_i Y_i; \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\hat{\sigma}_i^2 = \|Y_i - X\hat{\beta}_i\|^2 / (l - p)$$

$\hat{\beta}_i, \hat{\sigma}_i$ are independent. Let $Z_i = (\hat{\beta}'_i, \hat{\sigma}_i^2)$, $i = 1, 2, \dots, n$; then Z_1, Z_2, \dots, Z_n and $Z = (\hat{\beta}', \hat{\sigma}^2)'$ are i. i. d., having the same marginal probability density function (p. d. f.). Also since Z_1, Z_2, \dots, Z_n and Z are separately complete and sufficient for $\theta_i = (\beta'_i, \sigma_i^2)$, $i = 1, 2, \dots, n+1$, we may substitute Z_i for $Y_i, i = 1, 2, \dots, n$; Z for Y . We call Z_1, Z_2, \dots, Z_n the past samples, Z the present sample. Let $f(z|\theta)$ denote the conditional p. d. function of Z given θ , then

$$f(z|\theta) = C\sigma^{-l}\hat{\sigma}^{l-p-2}\exp\left\{-\frac{(l-p)\hat{\sigma}^2}{2\sigma^2}\right\}\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\hat{\beta} - \beta)'\Sigma^{-1}(\hat{\beta} - \beta)\right\} \quad (4)$$

where $C = [(l-p)/2]^{(l-p)/2} / (2\pi)^{l/2} |\Sigma|^{-1} \Gamma\left(\frac{l-p}{2}\right)$. The marginal p. d. function of Z is given by

$$f(z) = \int f(z|\theta)dG(\theta) \quad (5)$$

Let

$$g(z|\theta) = C\sigma^{-1} \exp\left\{-\frac{(l-p)\hat{\sigma}^2}{2\sigma^2}\right\} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\hat{\beta} - \beta)' \Sigma^{-1}(\hat{\beta} - \beta)\right\} \quad (6)$$

$$g(z) = \int g(z|\theta) dG(\theta) \quad (7)$$

We adopt $\delta(z) = P$ (accepting H_0 | given $Z=z$) as the randomized decision rule, then the Bayes risk incurred is

$$\begin{aligned} R(\delta, G) &= \iint_{\theta} \{L_0 f(z|\theta) \delta(z) + L_1 f(z|\theta) (1 - \delta(z))\} dG(\theta) dz \\ &= \iint_{\theta} \frac{a(b'\theta - d)}{\sigma^2} f(z|\theta) dG(\theta) \delta(z) dz + \iint_{\theta} L_1 f(z|\theta) dG(\theta) dz \\ &= a \int \alpha(z) \delta(z) dz + C_0 \end{aligned} \quad (8)$$

where

$$\begin{aligned} \alpha(z) &= \int_{\theta} \frac{b'\theta - d}{\sigma^2} f(z|\theta) dG(\theta) \\ &= b' \int_{\theta} \sigma^{-2} \theta f(z|\theta) dG(\theta) - d \int_{\theta} \sigma^{-2} f(z|\theta) dG(\theta) \end{aligned} \quad (9)$$

$$C_0 = \int_{\theta} L_1(\theta, d_1) dG(\theta) \quad (10)$$

Direct calculation shows

$$\alpha(z) = \hat{\sigma}^{l-r-2} [b'_1 \int_{\theta} \sigma^{-2} \theta g(z|\theta) dG(\theta) - d \int_{\theta} \sigma^{-2} g(z|\theta) dG(\theta) + b_{r+1} g(z)]$$

Now we give out two classes of prior distribution family

$$I_1: \mathcal{F}^1 = \{G : \int \sigma^{-(l+1)} dG(\theta) < \infty\} \quad (11)$$

$$I_2: \mathcal{F}^2 = \{G : \int \sigma^{-(2k+1)} dG(\theta) < \infty\}, \quad k \geq 2 \quad (12)$$

Lemma 1 Suppose $G \in \mathcal{F}^2$, then $g(z)$ has continuous r -th order mixed partial derivatives

$$g^{(r)}(z) = \frac{\mathcal{J}g(z)}{\partial \beta_1 \dots \partial \beta_r \partial \sigma^2} \quad (r_i \geq 0; i = 1, 2, \dots, p+1, 0 \leq r = \sum_{i=0}^{p+1} r_i \leq k)$$

which satisfies $g^{(r)}(z) = \int g^{(r)}(z|\theta) dG(\theta)$ and $|g^{(r)}(z)| \leq a$, where a is a constant independent of G and Z .

Proof The proof of this lemma is analogous to that of [7].

Form this lemma, we know that for \mathcal{F}^1 defined by (11), $g(z)$ always has the r -th mixed partial derivatives ($r=0, 1, 2$), and $|g^{(r)}(z)| \leq C$, ($r=0, 1, 2$), where C is independent of r, z, G . Also

$$g^{(r)}(z) = \int g^{(r)}(z|\theta) dG(\theta), \quad r = 0, 1, 2.$$

For \mathcal{F}^2 , $g(z)$ has the r -th ($0 \leq r \leq k$) order mixed partial derivatives and $|g^{(r)}(z)| \leq C$, C is independent of r, z, G

$$g^{(r)}(z) = \int g^{(r)}(z|\theta) dG(\theta)$$

thus

$$\frac{\partial g(z)}{\partial \hat{\beta}} = - \int \sigma^{-2} \Sigma^{-1} (\hat{\beta} - \beta) g(z|\theta) dG(\theta)$$

$$\frac{\partial g(z)}{\partial \sigma^2} = - \frac{l-p}{2} \int \sigma^{-2} g(z|\theta) dG(\theta)$$

Namely

$$\int \sigma^{-2} \beta g(z|\theta) dG(\theta) = \Sigma \frac{\partial g(z)}{\partial \hat{\beta}} - \frac{2\hat{\beta}}{l-p} \frac{\partial g(z)}{\partial \sigma^2}$$

$$\int \sigma^{-2} g(z|\theta) dG(\theta) = - \frac{2}{l-p} \frac{\partial g(z)}{\partial \sigma^2}$$

From (9) and the above two expressions

$$\alpha(z) = \sigma^{l-p-2} [b_1' \Sigma \frac{\partial g}{\partial \hat{\beta}} + \frac{2(d - b_1' \hat{\beta})}{l-p} \frac{\partial g}{\partial \sigma^2} + b_{r+1} g] \tag{13}$$

where

$$\frac{\partial g}{\partial \hat{\beta}} = \left(\frac{\partial g}{\partial \hat{\beta}_1}, \dots, \frac{\partial g}{\partial \hat{\beta}_p} \right)' \triangleq (g_{\hat{\beta}_1}^{(1)}, \dots, g_{\hat{\beta}_p}^{(1)})' \triangleq g_{\hat{\beta}}^{(1)}; \frac{\partial g}{\partial \sigma^2} = g_{\sigma^2}^{(1)}$$

A Bayes rule is clearly given by

$$\delta_\sigma(z) = \begin{cases} 1 & \text{if } \alpha(z) \leq 0 \\ 0 & \text{if } \alpha(z) \geq 0 \end{cases} \tag{14}$$

The resulting (minimal) Bayes risk is

$$R(G) \triangleq R(\delta_\sigma, G) = \inf_{\delta} R(\delta, G) = \int \alpha(z) \delta_\sigma(z) dz + C_\sigma \tag{15}$$

2 Proposed Empirical Bayes Test

In order to obtain the EB estimator of $\delta_\sigma(z)$, it's necessary to estimate $g(z)$, $\frac{\partial g}{\partial \hat{\beta}}$, $\frac{\partial g}{\partial \sigma^2}$. We adopt the kernel estimators.

Suppose $K_r(u) = \prod_{i=1}^{r+1} P_i(u_i)$, where $u = (u_1, \dots, u_{r+1}) \in R^{r+1}$, $r = \sum_{i=1}^{r+1} r_i$, where $r_i \geq 0$, $0 \leq r \leq k-1$ and $P_i(u_i)$, $u_i \in R^1$, $i = 0, 1, \dots, k-1$, (k is an integer larger than 1), are Borel-measurable functions, having the following properties:

1) $P_i(u_i) = 0$, when $u_i \notin (0, 1)$, $i = 0, 1, \dots, k-1$

2) $P_i(u_i)$ is bounded in $(0, 1)$

3) $\frac{1}{l_0!} \int y^{l_0} P_i(y) dy = \begin{cases} 1 & l_0 = i \\ 0 & l_0 \neq i \end{cases}$ for each i ($0 \leq i < k-1$).

where $0 \leq l_0 \leq k-1$

It is obvious that

$$\frac{1}{l_1! l_2! \dots l_{r+1}!} \int_{R^{r+1}} K_r(u) u_1^{l_1} \dots u_{r+1}^{l_{r+1}} du = \begin{cases} 1 & l_i = r_i, i = 1, 2, \dots, r+1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

where $l_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, p+1. 0 \leq \sum_{i=1}^{p+1} l_i \leq k-1.$

Let $0 < h = h(n)$ be a function of n such that $h \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty.$ Since $f(z) = \sigma^{l-r-2} g(z),$ we estimate $g^{(r)}(z)$ by

$$g_r^* = g_{i_1+r_2+\dots+r_{p+1}}^*(Z_1, \dots, Z_n; Z) = \frac{1}{nh^{r+p+1}} \sum_{i=1}^n \frac{K_r \left(\frac{Z_i - Z}{h} \right)}{\hat{\sigma}_1^{l-r-2}} I_{(\hat{\sigma}_1^2 > 0)} \tag{16}$$

Now we may estimate $\alpha_n(z)$ by

$$\alpha_n(z) = \hat{\sigma}^{l-r-2} \left[b'_{1'} \Sigma g_{i_1}^1 + \frac{2(d - b'_{1'} \hat{\beta})}{l - p} g_{i_2}^2 + g_n \right] \tag{17}$$

where $g_{i_1}^1$ is the estimator of $g_{i_1}^{(1)}$ defined by (16), $g_{i_2}^2$ is the estimator of $g_{i_2}^{(2)}$ defined by (16).

It is natural to define the EB decision rule as follows

$$\delta_n(z) = \begin{cases} 1 & \alpha_n(z) \leq 0 \\ 0 & \alpha_n(z) > 0 \end{cases} \tag{18}$$

Here, let E_f stand for the expectation with respect to the joint distribution of $(Z_1, Z_2, \dots, Z_n).$ Then the overall Bayes risk of $\delta_n(z)$ is

$$R_n \triangleq R_n(\delta_n, G) = a E_f \int \alpha(z) \delta_n(z) dz + C_0 \tag{19}$$

If $R_n \rightarrow R(G)$ as $n \rightarrow \infty,$ then the rule (18) is called asymptotically optimal (a. o.). If for a $\delta > 0, R_n - R_0 = O(n^{-\delta})$ as $n \rightarrow \infty,$ we will say that the rule is a. o. with rate $O(n^{-\delta}).$

3 Some Lemmas

In this paper C, C_1, C_2, \dots can stand for different constants in different cases, even in the same expression.

Lemma 2 For $R(G), R_n$ defined by (15), (19), we have

$$0 < R_n - R(G) \leq a \int \alpha(z) P(|\alpha_n(z) - \alpha(z)| > |\alpha(z)|) dz$$

Proof. See Lemma 1 of [2].

Lemma 3 For g_r^* defined by (16), $r=0, 1, 2.$ Suppose k is an integer larger than $r, G \in P^2 = \{G; \int \sigma^{-(2k+l)} dG < \infty\}$ and $0 < \lambda \leq 2.$ Then

$$E_f |g_r^* - g^{(r)}|^{\lambda} \leq C \{ (nh^{2r+p+1})^{-\lambda/2} \hat{\sigma}^{-\lambda(l-r-2)/2} + h^{\lambda(k-r)} \} \tag{20}$$

Proof $E_f |g_r^* - g^{(r)}|^r \leq 2[(\text{Var}_f g_r^*)^{r/2} + |E_f g_r^* - g^{(r)}|^r] \triangleq [I_1^{r/2} + I_2^r] \tag{21}$

First we notice that Z_1, \dots, Z_n are i. i. d., and $f(z) = 0,$ when $\hat{\sigma}^2 = 0$

$$\begin{aligned} I_1 &= \text{Var}_f g_r^* = \frac{1}{nh^{2(r+p+1)}} \text{Var}_f \left[\frac{K_r \left(\frac{Z_1 - Z}{h} \right)}{\hat{\sigma}_1^{l-r-2}} I_{(\hat{\sigma}_1^2 > 0)} \right] \\ &\leq \frac{1}{nh^{2(r+p+1)}} E_f \left[\frac{K_r^2 \left(\frac{Z_1 - Z}{h} \right)}{\hat{\sigma}_1^{2(l-r-2)}} I_{(\hat{\sigma}_1^2 > 0)} \right] \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{nh^{2(r+r+1)}} \int K_r^2\left(\frac{Z_1 - Z}{h}\right) g(z_1) / \hat{\sigma}_1^{-(r-2)} dz_1$$

Let $\frac{Z_1 - Z}{h} = u$ (Obviously $\hat{\sigma}_1^2 = \hat{\sigma}^2 + u_{r+1}h$). Since $0 < u_i < 1, i = 1, 2, \dots, p+1, u = (u_1, \dots, u_{r+1})$ and $h > 0$, we have

$$I_1 = \frac{1}{nh^{2r+r+1}} \int K_r^2(u) (\hat{\sigma}^2 + u_{r+1}h)^{-(r-2)/2} g(z + hu) du$$

$$\leq \frac{\hat{\sigma}^{-(r-2)}}{nh^{2r+r+1}} \int K_r^2(u) g(z + hu) du$$

Again since $G \in F$, from Lemma 1, we know that $|g(z)| \leq \alpha$, where α is a constant independent of z, G . Thus

$$I_1 \leq C \frac{\hat{\sigma}^{-(r-2)}}{nh^{2r+r+1}} \tag{22}$$

Secondly since

$$E_f g_r^* = \frac{1}{h^{r+r+1}} E_f \left[K_r \left(\frac{Z_1 - Z}{h} \right) I(\hat{\sigma}^2 > 0) \right]$$

$$= \frac{1}{h^{r+r+1}} \int K_r \left(\frac{Z_1 - Z}{h} \right) g(z_1) dz_1$$

Let $\frac{Z_1 - Z}{h} = u$, then

$$E_f g_r^* = \frac{1}{h^r} \int K_r(u) g(z + hu) du$$

By the condition $G \in F^2$, the $g(z)$ has k -th order mixed continuous partial derivatives and $|g^{(k)}(z)| < \alpha, \alpha$ is independent of k, z, G . Substituting $g(z + hu)$ by its k -th order Taylor expansion about z with Lagrange form of reminder at the k -th term and making use of the orthogonality properties of $K_r(u)$ and the fact that $K_r(u)$ vanishes outside $(0, 1)$, we get

$$I_2 = |E_f g_r^* - g^{(r)}| = \left| \frac{1}{h^r} \int K_r(u) g(z + hu) du - g^{(r)}(z) \right|$$

$$= h^{k-r} \left| \sum_{r_1 + \dots + r_{r+1} = k} \int \frac{g^{(k)}(z + \xi hu)}{r_1! \dots r_{r+1}!} K_r(u) u_1^{r_1} \dots u_{r+1}^{r_{r+1}} du \right|$$

$$\leq Ch^{k-r} \tag{23}$$

proof of (20) is now complete from (21), (22) and (23).

Lemma 4 For g_r^* defined by (16), $r = 0, 1$. Suppose $G \in F^1, 0 < h \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$, and $nh^{2r+r+1} \rightarrow \infty$, then for fixed z , we have

$$E_f |g_r^* - g^{(r)}|^2 \rightarrow 0 \quad r = 0, 1.$$

Proof This is a direct result of Lemma 3.

4 The a. o. of the Decision Rule δ_n

Theorem 1 Suppose $G \in F^1, 0 < nh^{r+3} \rightarrow \infty$ as $n \rightarrow \infty$. If the prior distribution G satisfies

$$\int \|\beta\|_1 \sigma^{-2} dG(\theta) < \infty$$

Then

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (R_n - R(G)) = 0 \tag{24}$$

Proof From Lemma 2, we get

$$0 < R_n - R(G) \leq a \int |\alpha(z) P(|\alpha_n(z) - \alpha(z)| \geq |\alpha(z)|) dz$$

Let

$$B_n(z) = |\alpha(z)| P(|\alpha_n(z) - \alpha(z)| \geq |\alpha(z)|)$$

Then

$$\begin{aligned} |B_n(z)| &\leq |\alpha(z)| \int |\alpha(z)| dz \leq \iint_{\theta} |b' \theta| \sigma^{-2} f(z|\theta) dG(\theta) dz + |d| \iint_{\theta} \sigma^{-2} f(z|\theta) dG(\theta) dz \\ &\leq \int \|\beta\|_1 \int_{\theta} (\|\beta\|_1 + \sigma^2) \sigma^{-2} f(z|\theta) dG(\theta) dz + |d| \iint_{\theta} \sigma^{-2} f(z|\theta) dG(\theta) dz \\ &= \|\beta\|_1 \int_{\theta} \|\beta\|_1 \sigma^{-2} dG(\theta) + \|\beta\|_1 \int_{\theta} dG(\theta) + |d| \int_{\theta} \sigma^{-2} dG(\theta) < \infty \end{aligned}$$

where the interchangeability of the above integral is guaranteed by $G \in F^1$ and the assumption of this theorem $\int_{\theta} \|\beta\|_1 \sigma^{-2} dG(\theta) < \infty$. Using the dominated convergence theorem, we have

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (R_n - R(G)) = a \int \lim_{n \rightarrow \infty} B_n(z) dz$$

Therefore it is sufficient to prove $\lim_{n \rightarrow \infty} B_n(z) = 0$, a. e. for z .

By Markov inequality

$$\begin{aligned} B_n(z) &= |\alpha(z)| P(|\alpha_n(z) - \alpha(z)| \geq |\alpha(z)|) \\ &\leq E_f |\alpha_n(z) - \alpha(z)| \\ &\leq E_f |\delta^{l-r-2} [b'_1 \Sigma (g_{p, n}^1 - g_p^{(1)}) + \frac{2(d - b'_1 \beta)}{l-p} (g_{r+2, n}^1 - g_{r+2}^{(1)}) + b_{r+1} (g_n - g)]| \\ &\leq \delta^{l-r-2} \left[\frac{2|d| + |b'_1 \beta|}{l-p} E_f |g_{r+2, n}^1 - g_{r+2}^{(1)}| \right. \\ &\quad \left. + |b_{r+1}| E_f |g_n - g| + E_f |b'_1 \Sigma (g_{p, n}^1 - g_p^{(1)})| \right] \\ &\leq \delta^{l-r-2} \left[\frac{2|d| + \|b_1\|_1 \|\hat{\beta}\|_1}{l-p} (E_f (g_{r+2, n}^1 - g_{r+2}^{(1)})^2)^{1/2} \right. \\ &\quad \left. + |b_{r+1}| (E_f (g_n - g)^2)^{1/2} + \|b_1\|_2 E_f \|\Sigma (g_{p, n}^1 - g_p^{(1)})\|_2 \right] \\ &\triangleq \delta^{l-r-2} \left[\frac{2|d| + \|b_1\|_1 \|\hat{\beta}\|_1}{l-p} Q_1 + |b_{r+1}| Q_2 + \|b_1\|_2 Q_3 \right] \end{aligned}$$

Let $r = r_{p+1} = 0$ or 1 in Lemma 4, then under the assumption of this theorem, we have

$$\begin{aligned} Q_1 &\rightarrow 0 && \text{as } n \rightarrow \infty \\ Q_2 &\rightarrow 0 && \text{as } n \rightarrow \infty \end{aligned}$$

Since $Q_3 = E_f \|\Sigma (g_{p, n}^1 - g_p^{(1)})\|_2 \leq \lambda^* \left(\sum_{i=1}^l E_f (g_{p, i, n}^1 - g_{p, i}^{(1)})^2 \right)^{1/2}$, where $\lambda^* = \max(\text{root } \Sigma)$.

By Lemma 4, we know that $Q_3 \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$, thus

$$\lim B_n(z) = 0, \quad \text{a. e.}$$

The proof is complete.

5 The Convergence rate of the EB Decision Rule δ_n

Theorem 2 Suppose $0 < \lambda < 1, l, k$ are integers, $l \geq p+2, G \in F^2, \alpha(z)$ is defined by (13) such that

$$\text{I) } \int |\alpha(z)|^{1-\lambda} \hat{\sigma}^{\lambda(l-r-2)} (\hat{\sigma}^{-\lambda(l-r-2)/2} + 1) dz < \infty$$

$$\text{II) } \int |\alpha(z)|^{1-\lambda} \hat{\sigma}^{\lambda(l-r-2)} \|\hat{\beta}\| \hat{\sigma}^{-\lambda(l-r-2)/2} + 1) dz < \infty$$

If $h_n = n^{-\frac{1}{2k+r+1}}$, then

$$R_n - R(G) = O(n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+r+1}})$$

Proof By Lemma 2 and Markov inequality

$$0 < R_n - R(G) \leq \int |\alpha(z)| P(|\alpha_n(z) - \alpha(z)| \geq |\alpha(z)|) dz$$

$$\leq C \int |\alpha(z)|^{1-\lambda} E_f |\alpha_n(z) - \alpha(z)|^2 dz$$

$$\leq C \int |\alpha(z)|^{1-\lambda} \{ \hat{\sigma}^{\lambda(l-r-2)} [E_f |b_1 \Sigma(g_{p,n}^1 - g_p^{(1)})|^2 + |b_{r+1}|^2 E_f |g_n - g|^2$$

$$+ C_1(|d|^2 + \|b_1\| \|\hat{\beta}\|) E_f |g_{r+2,n}^1 - g_{r+2}^{(1)}|^2] dz$$

$$\cong C \int |\alpha(z)|^{1-\lambda} \hat{\sigma}^{\lambda(l-r-2)} \{Q_1 + C_1 Q_2 + C_2(|d|^2 + \|b_1\| \|\hat{\beta}\|) Q_3\} dz$$

$$Q_1 = E_f |b_1 \Sigma(g_{p,n}^1 - g_p^{(1)})|^2 \leq \|b_1\|^2 E_f \|\Sigma(g_{p,n}^1 - g_p^{(1)})\|^2$$

$$\leq \|b_1\|^2 \frac{1}{2} (E_f \|\Sigma(g_{p,n}^1 - g_p^{(1)})\|^2)^{1/2}$$

$$\leq (\lambda^*)^2 \|b_1\|^2 \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^p E_f (g_{p,i,n}^1 - g_{p,i}^{(1)})^2 \right)^{1/2}, \text{ where } \lambda^* = \max(\text{root } \Sigma)$$

Take $h = n^{-1/(2k+r+1)}$ in Lemma 3, then

$$Q_1 \leq C_1 n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+r+1}} (\hat{\sigma}^{-\lambda(l-r-2)/2} + 1)$$

Analogously we have

$$Q_2 \leq C_2 n^{-\frac{\lambda k}{2k+r+1}} (\hat{\sigma}^{-\lambda(l-r-2)/2} + 1)$$

$$Q_3 \leq C_3 n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+r+1}} (\hat{\sigma}^{-\lambda(l-r-2)/2} + 1)$$

Let $\Delta = \hat{\sigma}^{-\lambda(l-r-2)/2} + 1$, then

$$R_n - R(G) \leq C n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+r+1}} \int |\alpha(z)|^{1-\lambda} \hat{\sigma}^{\lambda(l-r-2)} \Delta (C_1 + C_2 n^{-\frac{\lambda k}{2k+r+1}}$$

$$+ C_3(|d|^2 + \|b_1\| \|\hat{\beta}\|) dz$$

Therefore under the assumption I, II; we have

$$R_n - R(G) = O(n^{-\frac{\lambda(k-1)}{2k+r+1}})$$

We now complete the proof of this theorem.

The author wishes to thank Professor Wei Laisheng (Dept. of Math. University of Sci. & Tech. of China) for his helpful guidance during the preparation of this paper.

Reference

- [1] Robbins H, Prob. 3-rd. Berkeley Symp., *Math. Statist.*, Prob. 1(1955), University of California Press, 157-163.
- [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, *Chinese Journal of Applied Probability and Statistics*, 7(1991), No. 3, 299-310.
- [5] Wei Laisheng, *Sys. Sci. & Math. Sci.*, 2(1989), No. 4, 369-384.
- [6] Wei Laisheng, *Acta. Mathematicae Applicatae Sinica*, 6(1990), No. 3, 351-262.
- [7] Tao Bo, *J. Math. Res. & Exposition*, 6(1986), No. 1, 157-162.

多元线性回归模型中的经验 Bayes 检验

张顺普

(杭州师范学院)

摘 要

本文研究了线性模型中参数的经验 Bayes 检验的渐近最优性及其收敛速度问题。假设模型为 $Y = X\beta + \epsilon$, 其中 $\epsilon \sim N(0, \sigma^2 I)$, σ^2 未知。通过利用 X, Y 和 n 个相互独立的历史样本, 我们构造了 $\theta = (\beta', \sigma^2)'$ 的经验 Bayes 检验, 并证明了该检验与最优的 Bayes 检验相比是渐近最优的, 而且其收敛速度可以任意接近 $O(n^{-\frac{1}{2}})$ 。

关键词: 经验 Bayes, 线性模型, 渐近最优, 收敛速度

中图法分类号: O212.1

中国科学技术大学学报

第 22 卷 1992 年

总 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—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 (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 邬玉亭 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)
- 一类半参数回归模型中估计的收敛速度 高集体 (129)
- 边界层分离流动的三层结构理论计算 沈 平 马晖扬 (138)
- GaAs—AlAs 准晶超晶格振动特性研究 张海峰 徐文兰 郑兆勃 (146)
- 几种疑难心电图波形的自动识别方法探讨
..... 冯焕清 张更生 张作生 董守玲 薛长海 (151)
- 拮抗肌对的协同控制与 EMG 信号的中值频率关系
..... 周炳和 丁峭卫 刘 萍 吴晓红 (157)
- 离散神经网络的设计与实现 郭 立 金大胜 程义民 (165)
- 铁氧体法净化含重金属污水研究 丁 明 曾桓兴 (174)
- 常压塔计算机控制系统设计与实现 庞国仲 白方周 龙庆华 杨益涛 (180)
- 非线性积分—微分方程的传递函数 吕碧湖 殷保群 陈秋桂 杨孝先 (188)
- 均值非零的多元正态分布函数矩形区域的概率质量单调性 胡大忠 (265)
- $O(^3p)$ 原子与乙醚和异丙醚化学反应速率常数的测定 陈从香 周惠林 余枝广 (271)
- 柱位形等离子体中气球模的相干结构 陈银华 朱栋培 (277)
- 链霉菌 M1033 葡萄糖异构酶的分离纯化及其性质的研究
..... 黄婉治 王 淳 刘 兢 崔 涛 刘威安 牛立文 王玉珍 徐 洵 (283)
- 精密轴承钢球纳米级表面粗糙度的测量与评定

.....	黄文浩	J. M. 郭美思	A. M. 巴 罗	(290)
三维形体消隐和相贯线的一种新算法.....	朱仁芝	太美花	邓益民	(295)
关于酉群上插值问题的一些讨论.....			郑学安	(303)
内参型非协调元位移试解完备性的研究.....	焦兆平	吴长青	黄茂光	(308)
若干型实二次域的类群.....			张贤科	(393)
基于液晶测温技术的二维热传导自动分析.....	汪柳生	何世平	伍小平	(396)
光线跟踪生成三维真实感景物.....	吴建华		孙贞寿	(403)
西藏地壳模型及其化学成分初探.....		黎 彤	李 峰	(409)
复合材料等效导热系数的理论推算.....	陈则韶	钱 军	叶一火	(416)
超高分子量聚乙烯凝胶结晶膜的结晶形态 X 射线衍射研究				
.....	周贵恩	朱清仁	高建峰	戚嵘嵘
.....			洪昆仑	叶朝辉
.....				(425)

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)
$\text{Na}_2\text{Ho}(\text{WO}_4)_4$ 晶体的生长、结构及光谱性质	姚连增	程庭柱	阮耀钟	张裕恒		(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		(199)
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)
多孔硅的发光.....	方容川	李清山	崔景彪	马玉蓉		(195)
Schoenberg 变差缩减算子的迭代极限					陈发来	(199)
用激光干涉法分析薄膜应力.....	胡一贯	乐德芬			陈宁伟	(204)
关于具平行平均曲率向量场的三维紧致子流形的 Ricci 曲率的 Pinching 问题						
.....	陈广华	徐森林			陈 卿	(209)
自由原子的磁共振致冷模型.....	卞宝祥	姚 焜			郭光灿	(217)
卡尔曼滤波—分光光度法用于饮料中色素的同时测定						
.....	张绍雨	潘忠孝	张懋森	胡家英	潘延存	(221)
心电图体表电位图的生成法则.....		沈凤麟	郑永平	王宁全		(226)
链霉菌木糖异构酶缺陷型菌株的分离	崔 涛	刘咸安	陈 波	肖 杰		

- 王玉珍 刘 兢 牛立文 王 淳 徐 洵(232)
- 测定微量铍的分光光度法研究..... 金 谷 朱玉瑞 江万权 张婷婷 徐 炜(237)
- 利用热镜防止汽车挡风玻璃结霜的实验研究..... 张寅平 葛新石 梁新刚(241)
- 等谱与非等谱的 Kaup—Newell 方程簇的 Bäcklund 变换 李建泉(245)
- 高阶 KP 与高阶 MKP 方程间的 Miura 变换及高阶 KP 方程的 Bäcklund 变换
..... 唐国雄 程 艺(255)
- 实二次函数域的一个结果..... 邢朝平(318)
- 聚乙二醇增强 Rh-6G 水溶液发光能力的机制研究..... 李银妹 邓 杰(321)
- 植物叶绿体色素的纸色谱分离..... 赵贵文 崔 华 罗思泉 尹香莲(325)
- 用于扩展 X 射线吸收精细结构谱仪的多丝正比室的研究
..... 田 杰 赵淑君 吴岳林 王燕霞(331)
- 几种 MOCVD 用挥发性 β -二酮类金属螯合物的合成及初步研究
..... 曹传宝 彭定坤 杨萍华 孟广耀 张国赏(336)
- 暴雨过程环境涡散场能量收支特征..... 汪钟兴(342)
- PSD 激光测微仪的研制与精度分析..... 金泰义 李胜利 徐 育 郇 明(348)
- 用瞬态法对竖板夹层内自然对流换热的研究——双层玻璃窗最佳间距的确立
..... 张寅平 陈则韶 葛新石(354)
- 油池火蔓延过程的数值模拟..... 汪 箭 范维澄(361)
- 水泥结构裂缝检测系统..... 卢结成 戴英侠 庄镇泉(365)
- 自动限温加热带的起动态与过渡态参数的测量..... 周佩玲 彭 虎 吴耿锋 张汉昌(370)
- 广义 de Bruijn 图中 Euler 四路和 Hamilton 圈的计数..... 胡龙妹(375)
- 快速断面图象轮廓间插值..... 汪炳权 罗 斌(385)
- 关于 Roth 分布不等式的一个推广 孙 衡 徐延志(432)
- 表自然数为两个无平方因子数的和..... 余红兵 王巧林(440)
- 复合区间消去法在优化 $BaBr_2:Eu$ 制备条件中的应用
..... 陆肖璞 吴耿锋 周佩玲 施朝淑(445)
- 可见光波段发光多孔硅膜的结构特征研究 赵特秀 吕智慧 孙国喜 叶 坚 王晓平 刘磁辉 吴自勤(450)
- 有碰撞络合物模型计算 $CH(A^2\Delta)$ 电子态猝灭截面 余忠华 陈从香 陈嵘嵘(455)
- 小幅振动旋成体跨音速绕流的数值分析..... 陆夕云 夏 南 庄礼贤(461)
- 正交设计法在无火焰 AAS 中的应用 张 巽 高卫民 陶先刚 王振杰(468)
- 雄兔背部皮下埋植慢释放雄激素药物的实验 刘瑞芝 李希明 雷少琼 陈文明
..... 单春华 董勇治 韩 萍 赵 钢 郑 力(475)
- 烟气顶蓬射流非稳态温度场的分析计算..... 袁理明 霍 然 陈 莉(480)
- 智能式自动逻辑综合系统 KDLS 何中礼 庄镇泉(486)
- 正电子湮没辐射一维角关联实验的图示拟合软件 霍剑青 王晓蒲 蒋惠林 张志诚(492)
- 多元线性回归模型中的经验 Bayes 检验 张顺普(498)

JOURNAL OF CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 22 1992

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 Zixue* (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)
- Convergence Rates of Some Estimators for a Semiparametric Regression Model *Gao Jili* (129)
- The Calculation of Triple-Deck Theory of Boundary Layer Separation Flow
..... *Shen Ping, Man Huiyang* (138)
- The Vibrational Properties of GaAs-AlAs Quasi-Crystal Superlattice
..... *Zhang Haifeng, Xu Wenlan, Zheng Zhaobo* (146)
- The Method of Automatic Recognition of Several Kottly ECG Wave
..... *Feng Hutuqing, Zhang Gengsheng, Zhang Zhiosheng, Dong Shouling, Xue Changhai* (151)
- The Relations Between the Coactivation of the Elbow Antagonist Muscles and their EMG Median
Frequencies *Zhou Binghe, Ding Shaowei, Liu Ping, Wu Xiaohong* (157)
- Design and Implement of Discrete Time Neural Network
..... *Guo Li, Jin Dasheng, Cheng Yinni* (165)

- The Research of Treatment of Heavy Metal From Wastewater by Ferrite Process
 *Ding Ming, Zeng Huanzong*(174)
- Design and Realize of Computer Control System About Constant Pressure Distillation Column
 *Pang Guozhong, Bai Fangzhong, Long Qinghua, Yang Yitao*(180)
- The Transfer Function of Non-Linear Integral-Differential Equation Model
 *Lü Bihu, Yin Baoqun, Chen Qiugui, Yang Xiaoxian*(188)
- Monotonicity of the Probability of a Rectangular Region Under a Multinomial Distribution
 With Nonzero Means *Hu Taizhong*(265)
- The Measurements of Rate Constants for Reactions of $O(^3P)$ Atoms With Ether and Isopropyl
 Ether Molecules *Chen Congxiang, Zhou Huilin, Yu Zhiqiang*(271)
- Coherent Constructure of the Ballooning Mode in Plasma Cylinder
 *Chen Yinhua, Zhu Dongpei*(277)
- Purification and Properties of D-Glucose Isomerase From *Streptomyces M1033*
 *Huang Wanzhi, Wang Chun, Liu Jing,*
Cui Tao, Liu Xian'an, Niu Liwen, Wang Yuzhen, Xu Xun(283)
- Surface Roughness Measuring and Evaluating at Nanometer Scale for Precise Bearing Ball
 *Huang Wenhao, J. M. Gomez-Rodriguez, A. M. Baro*(290)
- A New Algorithm for Removing Hidden Lines and Obtaining Intersections of 3-D Objects
 *Zhu Renzhi, Tai Meihua, Deng Yimin*(295)
- A Discussion on Interpolations on Unitary Groups *Zheng Xuean*(303)
- A Study on the Completeness of Displacement Trial Function of Incompatible Elements With
 Internal Parameters *Jiao Zhaoping, Wu Changchun, Huang Maoqiang*(308)
- Class Groups of Certain Real Quadratic Fields *Zhang Xianke*(393)
- Automatic 2D Heat Transfer Analysis Based on Liquid Crystal Thermography Technique
 *Wang Liusheng, He Shiping, Wu Xiaoping*(396)
- Generating 3D Realize Scene With Ray-Tracing *Wu Jianhua, Sun Zhenshou*(403)
- A Preliminary Research on the model of Xizang(Tibet) Continental Crust and
 Its Chemical Composition *Li Tong, Li Feng*(409)
- Predicting Theory of Effective Thermal Conductivity of Complex Material
 *Chen Zeshao, Qian Jun, Ye Yihuo*(416)
- X-Ray Diffraction Study for Morphology of Ultra-High Molecular Weight Polyethylene
 Produced by Gelation/Crystallization
 *Zhou Guien, Zhu Qingren, Gao Jianfeng, Qi Rongrong, Hong Kunlun, Ye Chaohui*(425)

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 *Cao Hongkui, Wang Wenrong, Wei Junsu, Zhang Fengyou, Zhang Jirong* (79)
- Numerical Solution of Shocks' Motion in a Section-Changed Shocktube *Ouyang Liangbiao* (83)
- High Precision Inductance Outer Diameter Detector *Li Zhiquan, Chen Lingli, Shen Lansun, Wang Yingying* (90)
- The Artificial Neural Network Method In Mussel-Shrimp Fossil Recognition and Core *Lin Wen, Chen Xuequan* (95)
- Dynamic Parameters Identification of Resonator Force Sensor *Wang Qimin, Zhang Peiqiang, Tang Xinlu, Ma Wei* (100)
- 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* (106)
- Research on Surface Morphology of ZrO_2 Thin Films Deposited by Microwave Plasma Assisted CVD Process *Cao Chuanqiao, Yu Weijie, Meng Guangyao, Peng Dingkun, Li Fanping* (111)
- A Fast Photo-Counter With Multi-Level Buffers *Peng Hu, Zhou Peling, Yao Kun, Guo Guangcan* (119)
- Microcomputer-Based Detecting System for Gray Mark Recognition *Wu Gengfeng, Wan Bingkui, Gu Yuming, He Guanhua* (123)
- Luiminescence in Porous Silicon *Fang Rongchuan, Li Qingshan, Cui Jingbiao, Ma Yurong* (195)
- Limit of Iterates for Schoenberg-Variation Diminishing Operators *Chen Falai* (199)
- The Analyses of Stress in Thin Films by Laser Interference Technique *Hu Yiguan, Le Defen, Chen Ningwei* (204)
- On Pinching Problem of Ricci Curvature for 3-dimensional Compact Submanifolds With Parallel Mean Curvature *Chen Guanghua, Xu Senlin, Chen Qing* (209)
- Magnetic Resonance Cooling Model of Free Atoms *Bian Baoxiang, Yao Kun, Guo Guangcan* (217)
- Simultaneous Determination of Pigments in Drinks by Kalman Filter-Spectrophotometry *Zhang Shaoyu, Pan Zhongxiao, Zhang Maosen, Hu Jiaying, Pan Yancun* (221)
- Construction Rule of Isopotential Contour of Body Surface Electrocardiographic Map *Shen Fenglin, Zheng Yongping, Wang Ningquan* (226)
- The Isolation of a Xylose Isomerase Deficient Strain From *Streptomyces lividans* 66 TK64 *Cui Tao, Liu Xian'an, Chen Bo, Xiao Jie, Wang Yuzhen, Liu Jing, Niu Liwen, Wang Chun, Xu Xun* (232)
- Study on Highly Sensitive Spectrophotometric Method for Determination of Bismuth *Jin Gu, Zhu Yurui, Jiang Wanquan, Zhang Tingting, Xu Wei* (237)
- Experimental Investigation on the Antif-Frost Effect of Windscreens of Cars With Heat Mirror Coatings *Zhang Yinping, Ge Xinshi, Liang Xingang* (241)
- Bäcklund Transformations for the Isospectral and Non-Isospectral Kaup-Newell Hierarchies

- *Li Jianquan*(245)
- The Miura Transformation Between Higher Order KP Equations and the Bäcklund Transformation of Higher Order KP Equations *Tang Guoxiong, Cheng Yi*(255)
- A Result of Real Quadratic Function Fields *Xing Chaoping*(318)
- Investigation on the Mechanism of Increasing Luminescent Yield of the Rh-6G Aqueous Solution by the Polyglycol Additives *Li Yinmei, Deng Jie*(321)
- Paper-Chromatographic Separation of Plant Chloroplast Pigments *Zhao Guiwen, Cui Hua, Luo Siqian, Yin Xianglian*(325)
- The Development of the Multiwire Proportional Chamber for the Measurement of Extended of X-ray Absorptions Fine Structure *Tian Jie, Zhao Shujun, Wu Yuelin, Wang Yianxia*(331)
- Synthesis and Preliminary Study of Several Volatile Metal Beta-Diketonate Chelates *Cao Chuanbao, Peng Dingkun, Yang Pinghua, Meng Guangyao, Zhang Guoshang*(336)
- The Characteristics of Budget for Divergent and Rotational Components of Kinetic Energy in Heavy Rain Processes *Wang Zhongxing*(342)
- The Development of PSD Laser Measuring Micro-Displacement Instrument and Its Accuracy Analysis *Jin Taiyi, Li Shengli, Xu Yu, Li Ming*(348)
- Application of the Transient Method to the Investigation of Natural Convective Heat Transfer in Vertical Rectangular Enclosures — The Determination of the Optimal Space Gap of Double-Glazing Window *Zhang Yinqing, Chen Zeshao, Ge Xinshi*(354)
- Prediction of Flame Spreading of a Oil Pool *Wang Jian, Fan Weicheng*(361)
- Crack Testing System of Cement Structure *Lu Jiecheng, Dai Yingxia, Zhuang Zhenquan*(365)
- The Measurement of Parameters of Start state and Transitional State on the Self-Temperature-Limiting Heating Strips *Zhou Peiling, Peng Hu, Wu Gengfeng, Zhang Hanchang*(370)
- Enumeration of Euler Circuits and Hamilton Cycles in Generalized de Bruijn Digraphs *Hu Lungmei*(375)
- Fast Interpolating Between Cross-Sectional Contours *Wang Binqian, Luo Bin*(385)
- A Generalization of Roth Inequality on Distribution *Sun Heng, Xu Yanzhi*(432)
- On the Representations of a Number as a Sum of Two Square-free Numbers *Yu Hongbing, Wang Qiaoling*(440)
- The Applications of Combined Region Elimination Method to Optimization of Preparation Conditions of $BaBr_2 : Eu$ *Lu Xiaopu, Wu Gengfeng, Zhou Peiling, Shi Chaosu*(445)
- Structure Characteristic of Porous Silicon Films with Visible Photoluminescence *Zhao Texin, Lu Zhihui, Su Guoxi, Ye Jian, Wang Xiaoping, Liu Cihui, Wu Ziqin*(450)
- Calculation of Collisional Quenching Cross Sections of $CH(A^2\Sigma)$ by Some Molecules Using Collisional Complex Model *Yu Zhonghua, Chen Gongxiang, Chen Rongrong*(455)
- Numerical Analysis of Transonic Flow Around Oscillating Bodies of Revolution With Small Amplitudes *Lai Xiyun, Xia Nan, Zhuang Lixian*(461)

- Application of Orthogonal Design in Graphite Furnace Atomic Absorbtion Zhang Xun, Gao Weimin, Tao Xianggang, Wang Zhenjie (168)
- Experimental Study of Transplanted Region of Testicular Prosthesis in Vivo Liu Ruizhi, Li Ximing, Lei Shaoqiong, Chen Wenming, Shan Chunhua, Dong Yongzhi, Han Ping, Zhao Gang, Zheng Li (175)
- Computation of Non-steady Temperature Field of Smoke Ceiling Jet Yuan Liming, Huo Ran, Chen Li (180)
- An Intelligent Automatic Logic Synthesis System KDLS He Zhonggli, Zhuang Zhengquan (186)
- Plot Fit Software for Angular Correlation Positron Annihilation Radiation Huo Jianqing, Wang Xiaopu, Jiang Huilan, Zhang Zhicheng (192)
- Empirical Bayes Test in a Multiple Linear Regression Model Zhang Shanpu (198)

《市场经济研究》征稿征订启事

《市场经济研究》(原名《计划与经济》)是由宁夏自治区计委主办的综合性经济理论学术期刊,除固定发表国内著名专家学者的专文外,注重发表热衷于理论探索 and 实际应用相关研究的具有真知灼见的文章。主要栏目有:经济学家谈、决策者之论、理论新思维、科技与社会、生产力研究、改革与开放、未来与发展、城市与农村、现代西部风等。来稿一般不超过8千字,并附作者简介及近照一张。本刊收到来稿后一个月将处理意见通知作者。

本刊力求追踪新趋势,开拓新领域,开阔新视野。1993年第1期隆重推出“经济学家专号”,刊有张培刚、高尚全等20余位著名经济学家的专文,本刊现为季刊,每期120页码,激光照排胶印,国内自办发行,统一刊号CN64—1022/F,每期定价3元,全年12元(含邮费)。凡订阅者,请一律邮汇至宁夏银川市解放西街39号原《计划与经济》编辑部。

联系人: 白卫星、陈超美

邮 编: 750001

电话: (0951) 26381

《中国科学技术大学学报》征稿简则

1《中国科学技术大学学报》是由中国科学院主管,中国科学技术大学主办的综合性自然科学学术刊物。本刊的任务是以学术论文和研究简报的形式发表创造性科研成果。欢迎有新的理论、新的观点、新的见解、有明显的经济效益、社会效益的论文投寄本刊。对前沿科学与技术领域中探索研究的新成果优先刊登。除特约稿外,一般不刊登综述性和动态性文章。

2 来稿要求和注意事项

2.1 来稿体例,依其顺序为文章标题,作者姓名,作者单位,摘要,关键词,中图法分类号,文章正文(包括图、表),参考文献,英文摘要。

2.2 来稿一式两份,其中必须有一份手稿。学术论文一般不超过 8000 字(包括图表、参考文献),简报一般不超过 4000 字。中文稿件后附英文摘要,英文稿件后附中文摘要。

正文按叙述层次分若干级标题,分别用 1,2,3……;1.1,1.2,1.3……;1.1.1,1.1.2,1.1.3……,依此类推。

2.3 来稿请用单面稿纸钢笔书写,字迹清楚,卷面整洁,文中的物理量和计量单位要以 ISO 和 GB 为准,倘有例外,可参考惯例书写,必要时注明换算单位。公式中的字母符号,要用铅笔注明文种,大小写、正斜体、黑白体、特别是上、下角标要写清楚。一行排不下的公式回行要符合运算规则。

2.4 图要直观反映文章内容,所用字母符号要与正文一致,用硫酸纸着墨绘制,墨色要黑,线条要匀。照片要求图象清晰,层次分明,黑白反差大。

2.5 表一律为横线表,无纵线和斜线,所用字母符号、单位要与正文一致。图表要提供中英文对照的图题、表题、图版题。

2.6 参考文献,只摘最主要的列出,其编号应与正文引用顺序一致,非正式出版物或非作者直接阅读者请勿引用。

书写的顺序为:作者(姓前名后),文献题目,期刊名称,卷号(年),期号,页码。文献如为图书则注明:作者,译者,书名,出版者,出版地,年,页码。

3 本刊将在稿件投稿之日起 5 个月内决定刊用与否(须作重大修改的除外),本刊不允许一稿两投。

4 来稿经本刊审查通过后,须完全按上述要求定稿,才能正式刊用。来稿一经发表将按篇幅酌致稿酬,另赠抽印本 30 份。

5 本刊编辑部地址,安徽省合肥市金寨路 96 号。中国科学技术大学学报编辑部,邮编 230026。电话 301961

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4期(总第79期)1992年12月出版

Journal Of China University of

Science And Technology

(Quarterly, Started in 1965)

Vol. 22 No. 4 (Sum. 79) Dec. 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