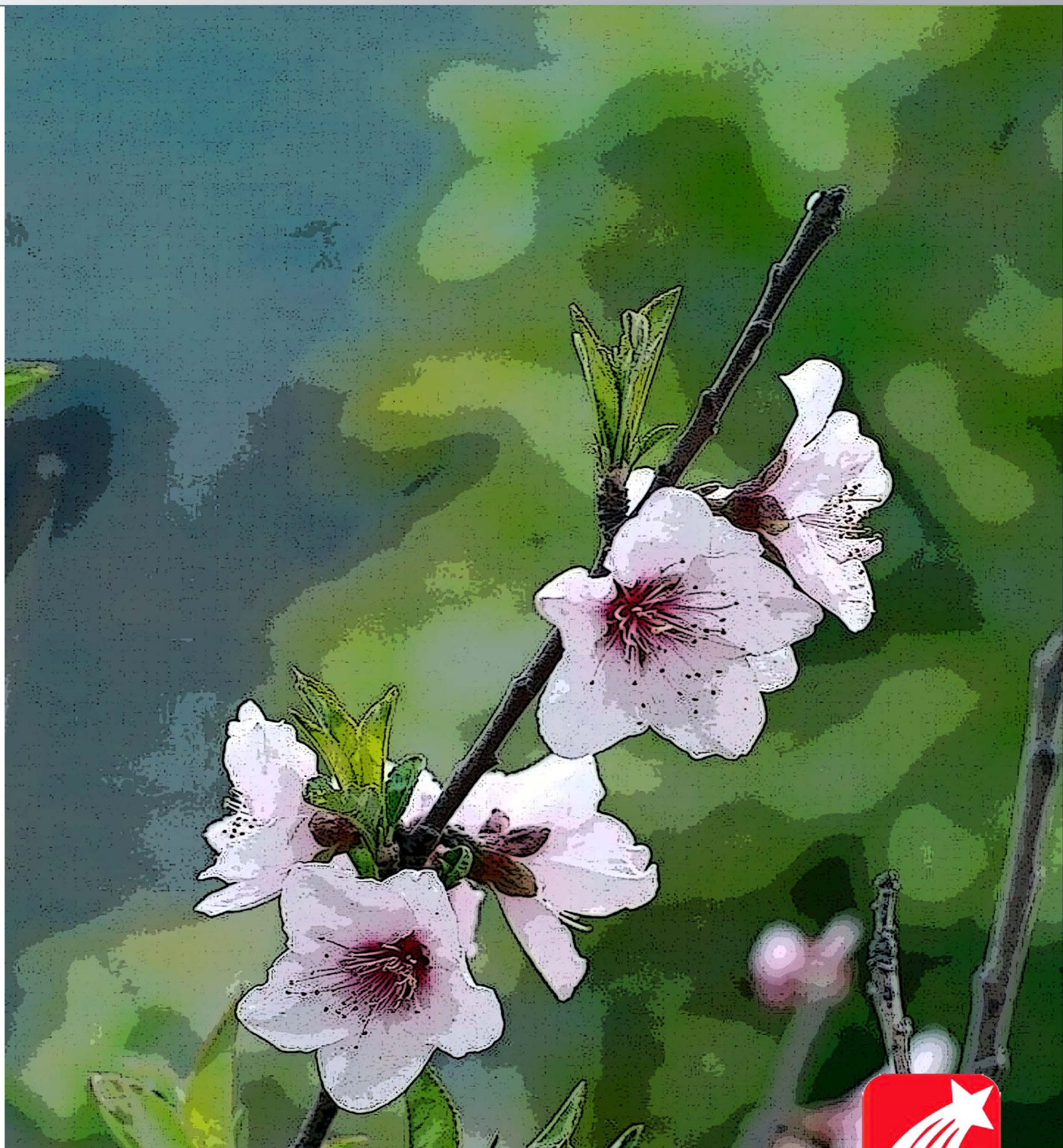


郑州大学学报(工学版)

2016年5月 第3期 第37卷



目 次

信息工程

- 一种基于合约的认知网络协作频谱共享策略…………… 穆晓敏, 师光强, 刘 颖, 杨守义(1)
- 基于双缓冲队列的海量地形数据并行处理方法…………… 陈小潘, 渠润涛, 赵亚萌, 王 鹏, 陈玉林(6)
- 基于自适应 Mel 滤波器组的 MFCC 特征提取的 SOC 设计 …… 陶佰睿, 郭 琴, 苗凤娟, 李青龙(11)
- 基于 WordNet 的本体查询方法研究…………… 陈淑鑫, 张凌宇(16)
- 基于压缩特征的稀疏表示运动目标跟踪…………… 张红梅, 温荟然, 张向利, 李鹏飞(21)

化工与材料工程

- 基于质子传导机理的四氮唑分子间氢键研究…………… 李惠萍, 于秀丽, 高鹏杰, 毛桢东(27)
- SAPO-56 分子筛的晶化区研究…………… 詹予忠, 董贺新, 董佳佳, 宋孟璐, 韩 丽(32)
- 草乌多糖金属配合物的制备、表征与抗癌活性研究……………
…………… 张 茜, 芮 瑞, 李佩佩, 冯翠宁, 雷 强, 龙 跃(36)
- 基于微加热器平台的高性能甲烷传感器…………… 郭联峰, 许宗珂, 段国韬, 李 铁(40)
- 基于 COMSOL Multiphysics 的静电纺丝电场分析…………… 刘正华, 王 兢, 杜海英(44)
- 铜掺杂氧化锡的制备及其气敏性能研究…………… 胡 骏, 葛美英, 尹桂林, 杨 帆, 何丹农(48)
- 氧化锌一维纳米棒的低温制备及其气敏性能…………… 樊慧庆, 马龙涛, 黄丽梅(52)

土木与交通工程

- SRC 柱-钢梁混合框架抗震性能研究…………… 楚留声, 崔中敏, 张俊峰, 赵 军(56)
- 基于通行效率最优的交叉口控制方式优选…………… 沈家军, 王 群(60)
- 基于地基系数法的横向受荷桩通解研究…………… 贺拴海, 贺小卫(64)
- 钢-砼混合梁斜拉桥的颤抖振时域分析…………… 李 宇, 李 钊, 李 琛(69)

机械工程

- 基于虚拟现实技术的十字轴锻造过程仿真…………… 王 栋, 张晓晴(74)
- 全矢支持向量回归频谱预测方法…………… 李凌均, 陈 超, 韩 捷, 陈 宏(78)
- 基于 LMS 的怠速状态方向盘振动试验研究…………… 王若平, 黄 杰(83)
- 针-网式离子风发生器的散热研究…………… 王 静, 蔡忆昔, 包伟伟, 李慧霞(88)

其他

- 折叠变形磁刺激圆形线圈空间磁场分析…………… 张春兰, 逯 迈, 陈小强, 魏孔炳(92)

CONTENTS

【Information Engineering】

- A Contract-Based Cooperative Spectrum Sharing Approach in Cognitive Radio System
..... **MU Xiaomin, SHI Guangqiang, LIU Ying, YANG Shouyi** (1)
- Double-Buffered Queue-Based Parallel Processing Algorithm for Massive Terrain Dataset
..... **CHEN Xiaopan, QU Jiantao, ZHAO Yameng, WANG Peng, CHEN Yulin** (6)
- Design of MFCC Feature Extraction Based on Adaptive Mel Filter Banks for SOC Application
..... **TAO Bairui, GUO Qin, MIAO Fengjuan, LI Qinglong** (11)
- Study on Ontology Query Based on WordNet **CHEN Shuxin, ZHANG Lingyu** (16)
- Sparse Representation Tracking Based on Compressed Features
..... **ZHANG Hongmei, WEN Huiran, ZHANG Xiangli, LI Pengfei** (21)

【Chemical Engineering and Material Engineering】

- Study on the Intermolecular Hydrogen Bonds of Tetrazole Based on Proton Conduction Mechanism
..... **LI Huiping, YU Xiuli, GAO Pengjie, MAO Zhendong** (27)
- Study on Crystallization Area of SAPO-56 Molecular Sieve
..... **ZHAN Yuzhong, DONG Hexin, DONG Jiajia, SONG Menglu, HAN Li** (32)
- Preparation, Characterization, and Anticancer Evaluation of Inner Mongolia Radix Aconiti Kusenezoffii Polysaccharide Metal Complexes **ZHANG Xi, RUI Rui, LI Peipei, FENG Cuining, LEI Qiang, LONG Yue** (36)
- High Performance Methane Gas Sensor Based on Micro-hotplatform
..... **GUO Lianfeng, XU Zongke, DUAN Guotao, LI Tie** (40)
- Electric Field Analysis in Electrospinning Based on COMSOL Multiphysics
..... **LIU Zhenghua, WANG Jing, DU Haiying** (44)
- Copper-doped Tin Oxide: Fabrication and Gas-sensing Properties
..... **HU Jun, GE Meiyong, YIN Guilin, YANG Fan, HE Dannong** (48)
- Low-temperature Synthesis and Gas Sensor Properties of One Dimensional ZnO Nanorods
..... **FAN Huiqing, MA Longtao, HUANG Limei** (52)

【Civil Engineering and Transportation Engineering】

- Study on the Seismic Performance of SRC Column-Steel Beam Hybrid Frame Structure
..... **CHU Liusheng, CUI Zhongmin, ZHANG Junfeng, ZHAO Jun** (56)
- Control Modes of Intersection Based on Efficiency Optimization **SHEN Jiajun, WANG Qun** (60)
- The Study of Lateral Load Pile General Solution Based on Modulus of Subgrade Reaction
..... **HE Shuanhai, HE Xiaowei** (64)
- Flutter and Buffeting Analysis for Cable-stayed Bridge with Steel-concrete Girder **LI Yu, LI Zhao, LI Chen** (69)

【Mechanical Engineering】

- Working Process Simulation of Cross Shaft Forging Based on Virtual Reality Technology
..... **WANG Dong, ZHANG Xiaoqing** (74)
- The Prediction Method of Frequency Spectrum Based on Full Vector Support Vector Regression
..... **LI Lingjun, CHEN Chao, HAN Jie, CHEN Hong** (78)
- Test Investigation on the Vibration of Steering Wheel under Idling Based on LMS **WANG Ruoping, HUANG Jie** (83)
- Cooling Performance Study of Ionic Wind Excited by Needles-Net Structure
..... **WANG Jing, CAI Yixi, BAO Weiwei, LI Huixia** (88)

【Others】

- Analysis of the Magnetic Induction Field Distribution for Deformed Round Coil with Bending Angle in Magnetic Stimulation ...
..... **ZHANG Chunlan, LU Mai, CHEN Xiaoqiang, WEI Kongbing** (92)

文章编号: 1671-6833(2016)03-0001-05

一种基于合约的认知网络协作频谱共享策略

穆晓敏, 师光强, 刘颖, 杨守义

(郑州大学 信息工程学院, 河南 郑州 450001)

摘 要: 为解决基于合约制的多个主用户和多个次用户间的协作频谱共享问题, 依据统计学的思想, 提出了一种以主用户获得期望总效用最大化为目标的合约设计方法. 主用户在为每个次用户设计合约时充分利用次用户接受的概率信息, 得到统计意义上的期望效用, 进而得到主用户期望总效用最大化的优化问题, 通过理论推导简化优化问题并利用遗传算法求出次优解, 即次优的合约集. 数值仿真表明: 通过引入统计信息成功解决了主、次用户的协作频谱共享问题, 与 DMA-UI 算法相比, 依靠统计学的方法可以使主用户在统计意义上获得更多的效用, 进而提高了主用户的能效与谱效.

关键词: 协作频谱共享; 合约理论; 非对称网络信息; 多主用户; 优化理论

中图分类号: TN925

文献标志码: A

doi: 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.001

0 引言

无线通信技术和应用的迅猛发展, 使得频谱资源匮乏问题日益严重. 目前的固定频谱分配制度导致资源平均利用率低下, 有限可用频谱和较低频谱资源利用率这一矛盾催生了认知无线电这一新技术. 该技术的核心是动态的频谱共享机制, 动态频谱共享允许非授权用户(次用户 SU)通过各种动态接入方式与授权用户(主用户 PU)共享频谱资源, 可以有效提升频谱利用率^[1-2]. 在基于认知的多点协作通信中, SU 作为中继换取 PU 释放空闲频谱, 双方交易的资源是频谱和功率, 成交的前提是双方都有收益, 收益通过构建各自的效用函数来评估, 文献[3]将这种交易建模为具有激励机制的市场驱动模型. 关于货币交易的频谱共享市场驱动模型, 目前的研究有拍卖理论、定价理论和市场理论^[4-6]. 该模型的应用假设是: 当 PU 有一些空闲频谱时, 货币交易的频谱共享是有效的; 当 PU 的自身需求高或者信道容量小时, PU 没有多余的频谱资源出售, 交易是无效的. 另外, 货币交易的频谱共享需要一个可靠的计费系统, 这在现实中难以实现, 因此, 资源交易的频谱共享是一个更好的选择^[7]. 在基于资源交易的协作频谱共享模式中, SU 为 PU 提供中继服务并获得 PU

释放的频谱资源; PU 在获得链路可靠通信的同时也节省了发射功率. 由此可知, 基于资源交易的协作通信机制有效提升了系统整体的谱效和能效. 已有的协作频谱共享研究大多集中在对称网络信息场景、单 PU 和多 SU 之间, 并基于 Stackelberg 博弈模型^[8]. 文献[9]针对经济学中的信息不对称场景, 提出一种能够有效揭露私有信息的合约理论. 文献[10]引入合约理论构建了非对称网络信息场景下单个 PU 和多个 SU 间的协作频谱共享优化模型, 以最大化系统吞吐量为目标, 设计最优合约. 文献[11]研究了多个 PU 和多个 SU 间的协作频谱共享问题, 针对对称网络信息场景, 提出了基于匹配理论的最优解决方案; 但对于非对称网络信息场景, 由于 SU 信息是未知的, 导致文献[11]仅得到了稳定的匹配方案, 故而该方案会导致 PU 损失过多的效用.

笔者在文献[11]的基础上, 研究了非对称网络信息场景下多个 PU 和多个 SU 间协作频谱共享的优化问题. 其主要贡献是提出了资源交易中的合约设计方案, 并以 PU 总效用最大化为目标, 建立了最优合约的优化及求解问题, 并利用遗传算法求出次优解. 数值实验结果表明: 提出的基于合约理论的协作频谱共享策略能有效提高系统的能效和谱效.

收稿日期: 2015-09-07; 修订日期: 2015-10-30

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61271421); 河南省重大科技攻关计划项目(112102210507)

作者简介: 穆晓敏(1955—), 女, 河南郑州人, 郑州大学教授, 博士生导师, 主要从事通信信号处理、认知无线研究, E-mail: iexmmu@zzu.edu.cn.

1 系统模型和效用函数

1.1 系统模型

存在多个 PU 和多个 SU 协作频谱共享的网络模型如图 1 所示. 该模型包含 M 个 PU 和 N 个 SU 通信链路 ($N > M$). 每条通信链路有一对收发天线. PU 和 SU 的收发天线分别为 $\{(PT_1, PR_1), \dots, (PT_M, PR_M)\}$, $\{(ST_1, SR_1), \dots, (ST_N, SR_N)\}$. 系统协作频谱共享机制为: 当 PU 信道条件较差时, SU 为 PU 链路提供中继转发服务, 保证 PU 链路的可靠通信; 作为协作转发的奖励, PU 释放空闲的信道资源与 SU 共享. 以 TDMA 为例, PU 和 SU 之间的协作分为 3 个阶段, 如图 1 所示.

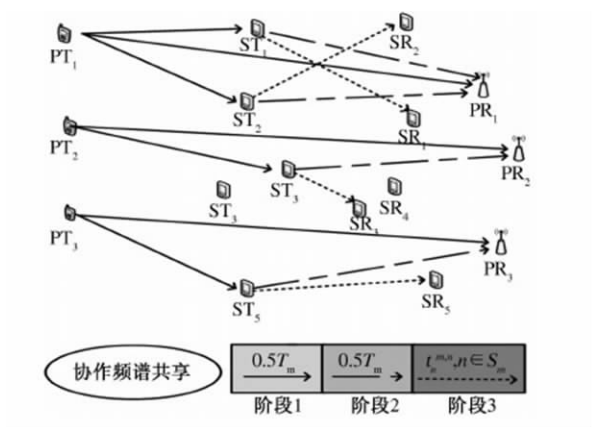


图1 系统模型

Fig.1 System model

阶段1: PU 发射端发送数据至对应的接收端和参与协作的 SU 发射端.

阶段2: 参与协作的 SU 发射端将阶段1收到的 PU 数据进行放大或解码转发给 PU 接收端.

阶段3: 参与协作的 SU 用 PU 释放的时隙资源, 按 TDMA 的方式, 发送自己的数据.

在上述协作频谱共享机制中, SU 的合作意愿建立在能与 PU 共享时间资源, PU 释放时间资源的前提是 SU 提供中继服务保证其链路的可靠通信. 协作双方若要在资源交换中达到各自的效用最大化, 均取决于是否存在有效的激励机制吸引双方积极和主动的协作. 为分析该协作机制的协作收益, 引入经济学中的合约理论, 将 PU 和 SU 希望从资源交换中获得各自效用最大化的问题转换为最优合约的设计问题.

1.2 主用户效用函数

假设 SU 在阶段2采用解码转发的方式, 并可解码成功, 且使用相同频带的中继信号之间没有干扰. 记与 PU_m 协作的 SU 集合为 S_m ; PU_m 为 SU_k ($SU_k \in S_m$) 设计的合约 $(p_{m,k}, t_{m,k})$, 其中

$p_{m,k}$ 为 PU_m 接收端收到 SU_k 转发信号的功率; $t_{m,k}$ 为 PU_m 允许 SU_k 的接入时间. 依据文献[11] PU_m 的效用函数 U_m 为:

$$U_m = \frac{1}{1 + \sum_{S_k \in S_m} t_{m,k}} \cdot \left(\frac{R_m^{\text{dir}}}{2} + \frac{1}{2} \log \left(1 + \frac{\sum_{S_k \in S_m} p_{m,k}}{\delta_m} \right) \right) - R_m^{\text{dir}}. \quad (1)$$

式中: 右端第一部分为 PU_m 的协作传输速率; R_m^{dir} 为 PU_m 的直连速率; δ_m 为 PU_m 接收端噪声功率.

1.3 次用户效用函数

设 SU_n 接受 PU_m 提供的合约 $(p_{m,n}, t_{m,n})$, 依据文献[11], SU_n 的效用函数 $u_n^{m,n}$ 为

$$u_n^{m,n} = \theta_{m,n} t_{m,n} - p_{m,n}. \quad (2)$$

$$\theta_{m,n} = \frac{2h_{ST_n, PR_m} (R_n - p_n^{\text{tr}})}{C_n}. \quad (3)$$

式中: R_n, p_n^{tr} 分别表示 SU_n 发送自身数据的速率和功率; h_{ST_n, PR_m} 表示 SU_n 发射端到 PU_m 接收端的信道增益; C_n 表示 SU_n 消耗单位能量的代价; $\theta_{m,n}$ 表示 SU_n 关于 PU_m 的属性, 通常反映 SU_n 的私有信息, 包括 SU_n 的传输速率、关于 PU_m 的中继链路信道增益和电池能量的转化效率.

2 非对称网络信息场景的最优合约

在非对称网络信息场景下, 对于 PU_m , 已知信息是网络中所有 SU 关于其属性值组成的集合 $\{\theta_{m,n}, 1 \leq n \leq N\}$, 具体属性值对应的 SU 是未知的. 不失一般性, 设 $\theta_{m,1} > \theta_{m,2} > \dots > \theta_{m,N}$.

2.1 最优合约的优化问题

为建立 PU 联合设计合约最大化 PU 期望总效用的优化问题, 考虑到 PU 可以为任意个类型设计合约, 由文献[10]可知, 在合约不变的情况下, 参与协作的 SU 类型越高, PU 的效用越大. 为最高类型(或类型值由高至低的多个)的 SU 设计合约是每个 PU 达到最大效用的必要条件. 因此, 优化问题转化为 PU_m 根据其已知的 $\{\theta_{m,n}, 1 \leq n \leq N\}$ 由高至低选择 n_m 个属性并为其设计合约, 记 $\{n_m, 1 \leq m \leq M\}$ 为 M 个 PU 设计合约个数的集合. 假设 PU_m 所设计的 n_m 个合约中, 有 s 个合约被对应 SU 接受的概率为 $pr_m(n_m, s)$, 则 PU_m 能够获得的期望效用为 $0 \leq s \leq n_m$ 所有情况下获得的效用乘以对应的概率之和, PU_m 为 n_m 个属性设计合约 $\{(t_{m,1}, p_{m,1}), \dots, (t_{m,n_m}, p_{m,n_m})\}$, PU_m 的期望效用的数学表达式为:

$$\bar{U}_m = \sum_{s=0}^{n_m} pr_m(n_m, s) \sum_{\omega \in \Omega(n_m, s)} U_m(\omega). \quad (4)$$

式中: $\Omega(n_m, s)$ 表示 n_m 个合约有 s 个达成的事件

集合; ω 代表 $\Omega(n_m, s)$ 中的一个事件; $U_m(\omega)$ 表示 ω 发生时, 在合约 $\{(t_{m,1}, p_{m,1}), \dots, (t_{m,n_m}, p_{m,n_m})\}$ 下, 根据式(1)得到的 PU_m 效用. PU 期望总效用函数为

$$\bar{U}^{\text{tot}} = \sum_{m=1}^M \bar{U}_m = \sum_{m=1}^M \sum_{s=0}^{n_m} pr_m(n_m, s) \sum_{\omega \in \Omega(n_m, s)} U_m(\omega). \quad (5)$$

根据[10]中的定理2, PU 期望总效用的优化问题可以写为

$$\max_{(n_m, \{t_{m,i}, p_{m,i} | 1 \leq i \leq n_m\}), 1 \leq m \leq M} \bar{U}^{\text{tot}}. \quad (6)$$

约束条件为:

条件1, 对 $1 \leq m \leq M$, 满足

$$\begin{cases} t_{m,1} \geq t_{m,2} \geq \dots \geq t_{m,n_m} \geq 0; \\ p_{m,1} \geq p_{m,2} \geq \dots \geq p_{m,n_m} \geq 0; \\ \theta_{m,n} t_{m,n_m} - p_{m,n_m} \geq 0. \end{cases}$$

条件2, 对 $1 \leq m \leq M, 1 \leq k \leq n_m$, 满足

$$\begin{cases} p_{m,k} \leq p_{m,k+1} + \theta_{m,k} (t_{m,k} - t_{m,k+1}); \\ p_{m,k+1} + \theta_{m,k+1} (t_{m,k} - t_{m,k+1}) \leq p_{m,k}. \end{cases}$$

2.2 优化问题的简化

问题(6)是非凸问题, 直接求解式(6)十分困难. 为简化计算, 对式(6)进行简化, 首先考虑多个 PU 是相互合作的, 设 PU 设计合约个数相同, 简化计算 $pr_m(n_m, s)$; 其次建立最优中继功率和接入时间的关系, 减少优化的变量. 根据参考文献[10], 对任意 $m=1, 2, \dots, M$, 在固定接入时间 $\{t_{m,1}, t_{m,2}, \dots, t_{m,n_m}\}$ 的条件下, 最优的中继功率 $\{p_{m,1}^*, p_{m,2}^*, \dots, p_{m,n_m}^*\}$ 近似有以下关系:

$$p_{m,k}^*(\{t_{m,k}, 1 \leq k \leq K\}) = \begin{cases} \theta_{m,n_m} t_{m,n_m}, k = n_m; \\ \theta_{m,n_m} t_{m,n_m} + \sum_{i=k}^{n_m-1} \theta_{m,i} (t_{m,i} - t_{m,i+1}), 1 \leq k < n_m. \end{cases} \quad (7)$$

因此, 式(6)可以近似简化为

$$\max_{(n_m, \{t_{m,i} | i=1, \dots, n_m\})} \sum_{m=1}^M \sum_{s=0}^{n_m} pr_m(n_m, s) \sum_{\omega \in \Omega(n_m, s)} U_m(\omega), \quad (8)$$

$$t_{m,1} \geq t_{m,2} \geq \dots \geq t_{m,n_m} \geq 0, 1 \leq m \leq M.$$

若 SU 由多个 PU 提供合约, SU 和每个协作的概率均等, 则在 PU 均为 $K (1 \leq K \leq N)$ 个 SU 设计合约条件下, 单个合约被接受的概率为

$$P(K) = \sum_{L=1}^M \frac{1}{L} P_K(L). \quad (9)$$

式中: $P_K(L)$ 表示某个合约对应 SU* 被 L 个 PU 提供合约的概率, 通过简单的数学推导可知:

$$P_K(L) = \frac{C_{M-1}^{L-1} (C_{N-1}^{K-1})^{L-1} (C_{N-1}^K)^{M-L}}{(C_N^K)^{M-1}}. \quad (10)$$

因此, 单个合约被接受的概率为

$$P(K) = \sum_{L=1}^M \frac{1}{L} \frac{C_{M-1}^{L-1} (C_{N-1}^{K-1})^{L-1} (C_{N-1}^K)^{M-L}}{(C_N^K)^{M-1}}. \quad (11)$$

PU 设计 K 个合约有 s 个被接受的概率为

$$pr(K, s) = P(K)^s (1 - P(K))^{K-s}. \quad (12)$$

通过上述的分析, 式(8)可以简化为

$$\left\{ \begin{array}{l} \max_{(K, \{t_{m,i} | i=1, \dots, K\})} \sum_{m=1}^M \left(\sum_{s=0}^K (P(K)^s \cdot (1 - P(K))^{K-s} \cdot \sum_{\omega \in \Omega(K, s)} U_m(\omega)) \right), \\ t_{m,1} \geq t_{m,2} \geq \dots \geq t_{m,n_m} \geq 0, 1 \leq m \leq M. \end{array} \right. \quad (13)$$

3 数值仿真及结果分析

为了验证笔者提出的效用函数和合约设计方案的正确性及有效性, 采用 matlab 平台对问题(13)描述的优化问题进行了数值仿真实验, 并通过遗传算法求解问题(13).

PU 设计合约的个数对 PU 可实现的期望总效用的影响如图2所示. 仿真的主要参数设置如下: $M=2, N=10, R_1^{\text{dir}}=0.5, R_2^{\text{dir}}=0.5$, SU 关于 PU 的属性服从 5~25 的均匀分布. 由图2可以看出, 设计2个合约时, PU 的期望总效用达到最大. 这是因为, 当设计合约个数小于2时, 若合约被拒绝, PU 没有 SU 为其提供中继服务. 相比设计合约个数等于2时没有合约被接受的概率, 设计1个合约最终没有 SU 提供中继服务的概率会大得多, 此时会对 PU 的期望总效用产生很大影响. 当设计合约个数大于2时, 由于优先为属性值高的 SU 提供合约, 随着提供合约个数增多, SU 的整体属性就会下降.

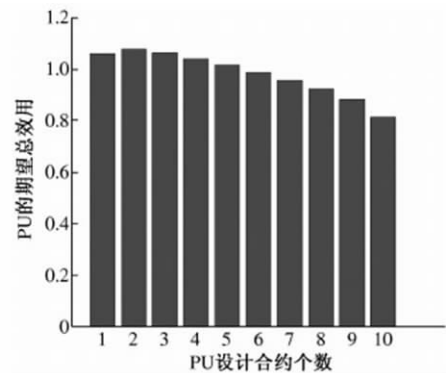


图2 PU 可实现的期望总效用与设计合约个数的关系
Fig.2 The relationship between PU's expected total utility and the number of contract

网络中 PU 的信道环境对协作效用的影响如图 3 所示. 基本参数设置为: $M=2, N=3$, SU 关于 PU 的属性服从 $5 \sim 25$ 的均匀分布. 由图 3 可以看出, 当两个 PU 直连速率最小时 PU 的期望总效用达到最大, PU 的期望总效用随着 PU 的直连速率的增加而减小, 原因是随着 PU 的直连速率增大, SU 对 PU 的中继增益会逐渐减弱.

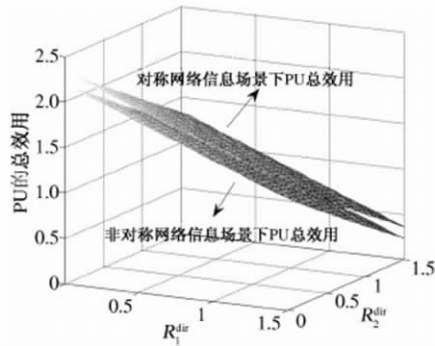


图3 PU 的直连速率与 PU 期望总效用的关系

Fig.3 The relationship between PU's expected total utility and PU's directional data rate

网络中的 SU 个数对总效用的影响如图 4 所示, 并与文献 [11] 中 DMA-UI 算法进行了比较. 仿真参数设置如下: $M=2, R_1^{\text{dir}}=0.5, R_2^{\text{dir}}=0.7$, SU 关于 PU 的属性服从 $5 \sim 25$ 的均匀分布. 由图 4 可以看出, 笔者所提算法与 DMA-UI 算法的性能接近, 这也说明了笔者所提的共享策略的可靠性. 另外, 随着网络中 SU 的个数增加, PU 的期望总效用逐渐增加, 并收敛到对称网络信息场景下所实现的总效用. 原因是网络中的 SU 个数增加, 合约被接受概率增大, 并趋向于 1; 概率等于 1 时, PU 之间没有竞争, 即对称网络信息场景.

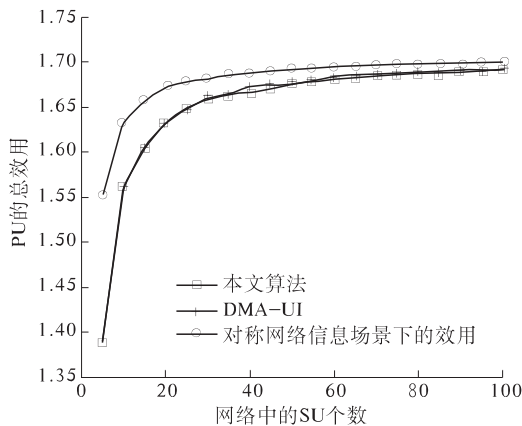


图4 本文算法与 DMA-UI 算法的性能比较

Fig.4 The comparison between our algorithm and DMA-UI algorithm

为进一步比较本文算法和 DMA-UI 算法的性能, 仿真参数设置同上, 网络中 PU 对应的 SU 分

为两类: 第一类有一个 SU, 该 SU 关于 PU 的属性服从 $20 \sim 40$ 的均匀分布; 另一类关于 PU 的属性服从 $5 \sim 25$ 的均匀分布. 本文算法和 DMA-UI 算法比较如图 5 所示. 由图 5 可以看出, 笔者提出的算法优于 DMA-UI 算法. DMA-UI 算法的思想是每个 PU 在获得固定效用的条件下设计单个合约, 然后所有 PU 选择合约并告知对应的 PU 结果, 当多于 1 个 SU 选择 PU 的合约时, PU 会设计新的合约以让自己获得更大的效用. 以此类推, 至只剩一个 SU 选择合约时终止. 当 PU 将效用增加至一定程度, 愿意协作的 SU 个数减为 1, 由于网络中存在一个高属性值的 SU, 如果 PU 继续增加效用要求设计新的合约, 该 SU 会继续选择协作, DMA-UI 算法会停止继续增加 PU 效用要求, PU 会损失一定的效用.

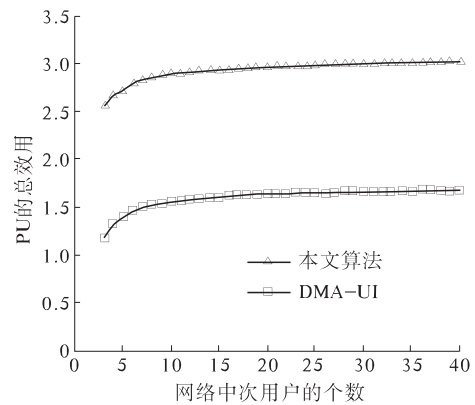


图5 本文算法与 DMA-UI 算法的性能比较

Fig.5 The comparison between the proposed algorithm and DMA-UI algorithm

4 结束语

笔者针对存在多个 PU 和 SU 的基于认知的多点协作通信网络, 建立了基于合约理论的协作频谱共享模型, 引入激励机制并设计了主、次用户的效用函数, 提出了非对称网络场景中 PU 最优合约的设计方案. 数值仿真验证了具有激励机制的合约设计有效提高了协作系统的总效用, 从而提高了系统的能效与谱效. 另外, 在实际网络中 PU 已知的信息多是 SU 关于自身的属性服从的概率分布, 因此, 在此条件下的多个 PU 和多个 SU 的协作频谱共享问题有待进一步的研究.

参考文献:

- [1] 邱晶, 周正. 认知无线网络中的分布式动态频谱共享[J]. 北京邮电大学学报, 2009, 32(1): 69-72.
- [2] 王钦辉, 叶保留, 田宇, 等. 认知无线网络中频

- 谱分配算法 [J]. 电子学报, 2012, 40(1): 147 – 154.
- [3] NIYATO D, HOSSAIN E, HAN Z. Dynamics of multiple-seller and multiple-buyer spectrum trading in cognitive radio networks: A game theoretic modeling approach [J]. IEEE Trans on mobile computing, 2009, 8(8): 1009 – 1022.
- [4] 李研, 宋起柱, 赵蔚, 等. 频谱拍卖机制研究 [J]. 中国无线电, 2010(6): 8 – 12.
- [5] 王钢, 曾祺. 定价机制下认知无线网络频谱接入算法 [J]. 哈尔滨理工大学学报, 2014, 19(2): 115 – 119.
- [6] NIYATO D, HOSSAIN E. Competitive pricing for spectrum sharing in cognitive radio networks: Dynamic game, inefficiency of nash equilibrium, and collusion [J]. IEEE Sel areas commun, 2008, 26(1): 192 – 202.
- [7] GAO Lin, GAN Xiaoying, WANG Xinbing, et al. Cooperative spectrum sharing in cognitive radio networks: A game theoretic Approach (C) //Proc IEEE Int'l Conf on Communications. Southampton, Englad: IEEE Press, 2010: 1 – 5.
- [8] HAN Y, PANDHARIPANDE A. Cooperative spectrum sharing via controlled amplify-and-forward relaying. [C] //Proc IEEE 19th Int'l Symp, Personal, Indoor and Mobile Radio Comm. Riviera, French: IEEE Press, 2008: 1 – 5.
- [9] BOLTON P, DEWATRIPONT. Contract theory [M]. Boston, Massachusetts, USA: MIT Press, 2005.
- [10] DUAN Lingjie, GAO Lin, HUANG Jianwei. Cooperative spectrum sharing: A contract-based approach [J]. IEEE Trans on mobile computing, 2014, 13(1): 177 – 187.
- [11] FENG Xinxin, SUN Gaofei, GAN Xiaoying, et al. Cooperative spectrum sharing in cognitive radio networks: A distributed matching approach [J]. IEEE Trans on communications, 2014, 62(8): 2651 – 2664.

A Contract – Based Cooperative Spectrum Sharing Approach in Cognitive Radio System

MU Xiaomin, SHI Guangqiang, LIU Ying, YANG Shouyi

(School of Information Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: To solve the problem of contract-based cooperative spectrum sharing between multiple primary users and multiple secondary users, we put forward a contract design method based on statistical theory to maximize the total utility of primary users. Firstly, the primary users make full use of the accepting contract statistical information of secondary users to design a reasonable contract. Then, the primary users according to the statistical expected utility to obtain the optimization problem of maximizing theirs total expected utilities. Furthermore, we simplify the problem in theory and exploit the genetic algorithm to derive the sub-optimal solution. The simulation results and analysis show the contract design method can solve the problem of contract-based cooperative spectrum sharing successfully. Compared with the DMA-UI, the approach we formulated can make primary users obtain a higher utility, and further improve the primary users' energy efficiency and spectrum efficiency.

Key words: cooperative spectrum sharing; contract theory; incomplete information; multiple primary users; optimization theory

文章编号: 1671-6833(2016)03-0006-05

基于双缓冲队列的海量地形数据并行处理方法

陈小潘¹, 渠润涛^{1,2}, 赵亚萌², 王 鹏^{1,2}, 陈玉林¹

(1. 河南大学 计算机与信息工程学院, 河南 开封 475004; 2. 中国科学院 遥感与数字地球研究所, 北京 100012)

摘 要: 海量地形数据处理过程中, 硬件的性能优势不能得到充分利用, 已成为制约大规模地形绘制速度的瓶颈。针对这一问题, 分析了影响硬件处理能力发挥的关键因素, 采用双缓冲队列的设计思路, 提出了一种支持海量地形数据的并行处理方法, 即将大规模地形绘制分为数据处理和渲染绘制两个独立的过程, 分别进行并行处理: 设立两个缓冲队列, 将数据的读、写操作区分开来; 充分考虑了瓦片加载的优先级, 并据此进行任务分配。实验表明, 该方法有效地提升了大规模地形绘制的整体速度。

关键词: 海量地形数据; 双缓冲队列; 并行化; 大规模地形绘制; 瓦片加载

中图分类号: TP391 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.002

0 引言

大规模地形绘制在战场模拟、虚拟现实以及地理信息系统中都有着广泛的应用^[1-2]。然而, 用于生成地形瓦片模型的高程数据以及纹理数据的数据量大, 无法一次性全部存入内存。通常的解决方法是将数据按照金字塔模型的标准进行切分, 分块调入内存^[3-5], 使得一个三维场景由相当数量的地形瓦片模型构成。在硬件处理能力不足的情况下, 尽可能地简化地形瓦片模型的复杂度, 是实现大规模地形绘制的一个重要手段^[6]。然而, 随着计算机图形处理硬件性能的不断提高, 如何有效地调度及处理大量的瓦片数据, 使得计算机的处理能力能够得到充分利用, 已经成为提升大规模地形绘制速度的一个关键。

近几十年来, 国内外学者在大规模地形实时绘制方面进行了大量的研究, 一个主流研究方向是基于层次细节模型 (LOD, Levels of Detail)^[7-10]。该方法的主要思路是采用不同的标准筛选出每个无效的三角形并剔除, 以减少待渲染三角形的数量。但近几年, 随着 CPU (Central Processing Unit) 和 GPU (Graphics Processing Unit) 等硬件的处理能力不断提升, 通过一定的技术手段, 充分发挥硬件的处理能力, 已经成为提升大规模

地形绘制速度的一个新的方向^[11-13]。

基于以上研究现状, 笔者提出了一种基于双缓冲队列的海量地形数据并行处理方法: 在依据瓦片加载优先级进行任务分配后, 将地形数据处理与地形瓦片模型的渲染绘制分隔开来, 分别进行并行处理, 以充分发挥硬件的性能; 同时, 设计两个缓冲队列交替作为数据的读队列和写队列, 减少了线程间同步产生的开销, 并利用 WPF (Windows Presentation Foundation) 技术完成任务。

1 问题分析与整体架构设计

大规模地形绘制中海量地形数据的处理, 通常由多个地形瓦片数据的处理组合而成^[14]。采用单缓冲队列的单线程处理流程效率较低, 可采用单缓冲队列的并行处理机制进行处理, 如图 1 所示。

数据处理和渲染绘制分别进行处理的设计模式区分了 CPU 与 GPU 的职责, 并行处理方式也使得两者的性能在整个海量地形数据处理的过程中都得到了充分的利用。但单一的缓冲区在面对多线程的读写操作时, 会出现线程同步的问题, 造成时间上的浪费。同时, 在加载瓦片时, 并未考虑瓦片加载的优先级, 也降低了用户体验。因此, 笔者设计了一种基于双缓冲队列的海量地形数据处理方法, 该方法具有以下特点。

收稿日期: 2015-09-26; 修订日期: 2015-11-19

基金项目: 国家“973”计划资助项目 (Y070072070); 国家国防科技工业局高分重大专项项目 (Y4D0100038; Y4D00100GF)

作者简介: 陈小潘 (1982—), 男, 河南偃师人, 河南大学讲师, 博士研究生, 主要从事空间分析优化、图像处理与模式识别研究, E-mail: xpchen@henu.edu.cn.

(1) 根据瓦片中心点与视线的距离,设立瓦片加载的优先级.当距离越近,则优先级越高,在单个线程中优先级越高的瓦片就越早被加载.

(2) 将瓦片的绘制过程分为数据处理和渲染绘制两个独立的过程,并采用多线程并发的策略进行加速.

(3) 采用双缓冲队列的设计思路,减少了线程间同步产生的开销.

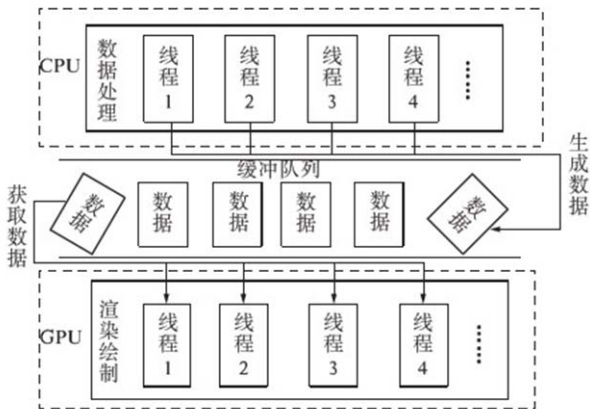


图1 单缓冲队列的并行处理机制

Fig.1 Parallel processing mechanism of single buffer queue

基于双缓冲队列的海量地形数据并行处理架构,主要由瓦片数据选取及优先级处理、双缓冲队列、数据处理以及渲染绘制4个主要模块构成,其整体架构设计如图2所示.

其中,瓦片数据选取及优先级处理模块主要根据当前的视域范围选取待加载瓦片数据;同时,根据视点与瓦片之间的距离,计算所有待加载瓦片数据的优先级,生成瓦片加载优先级队列,并将生成的瓦片加载优先级队列传递给数据处理模块.

缓冲队列1和缓冲队列2的主要功能是提供固定大小的数据缓冲空间,分别负责读出和写入,使读操作和写操作分别针对不同的缓冲区进行,从而减少了线程间同步的开销.当读队列为空,或者写队列满时,两个队列会进行交换,保证读写操作能够不间断进行.

数据处理模块能够根据瓦片的绘制优先级为各个线程分配数据处理任务,保证每个线程中优先级较高的瓦片数据能够优先被处理.数据处理任务主要有:根据地形瓦片模型网格的大小对高程数据进行插值拉伸;计算网格顶点的索引值;以及确定每个顶点的纹理映射等.数据处理完毕后,

直接存入写队列中;在写队列满时,能够控制队列交换.

渲染绘制模块能建立多个线程,且并行地从读队列中读出数据,利用读出的数据最终生成地形瓦片模型,加载到场景中.在读队列为空时,能够控制队列进行交换.

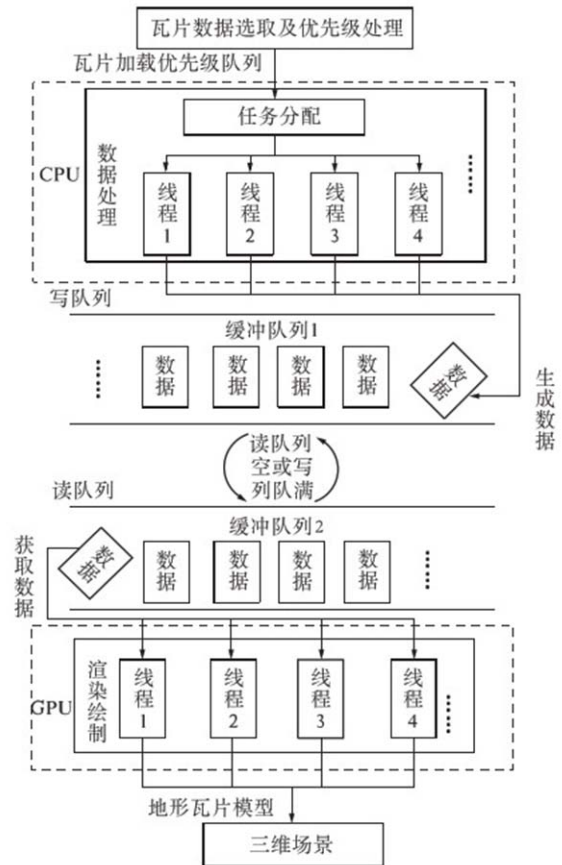


图2 双缓冲队列的并行处理机制整体架构图

Fig.2 Parallel processing mechanism of double queue

2 算法实施

笔者采用金字塔模型对海量地形数据进行组织和存储,其基本思想是自底向上生成金字塔,根据需求直接取其中某一级作为操作对象以提高整体效率.在实现海量地形数据处理之前,场景中所有待处理的高程数据以及纹理数据,均已经按照金字塔瓦片模型的设计思路,按 Google Map 标准切分成瓦片,切分后的瓦片数据按照以下形式存储在本地,如“D:\Root\4\3\2.abc”,该路径所代表的含义是“磁盘根目录\数据根目录\层级\行号\列号.后缀名”.

步骤1:计算待加载瓦片行列号的范围.首先,根据屏幕的可视范围,建立同屏幕视域等大的边界盒(Bounding Box, BBOX).在 Google Map 标

准中,可以通过公式(1)~(3)获取任意经纬度所在瓦片的行列号:

$$n = 2^{\text{zoom}}; \quad (1)$$

$$x_{\text{tile}} = \frac{(\text{lon} + \pi)}{2\pi} \times n; \quad (2)$$

$$y_{\text{tile}} = n - (1 - (\log \frac{\tan(\text{lat}) + \sec(\text{lat})}{\pi})) / 2 \times n. \quad (3)$$

式中: n 是当前层级列方向或行方向上瓦片总数; zoom 是层数; x_{tile} 和 y_{tile} 分别表示列号和行号; lon 是瓦片左上角的经度; lat 是瓦片左上角的纬度。

然后,将边界盒的最小经度、纬度以及最大经度、纬度分别代入公式(1)~(3),就能够确定整个可视范围内待加载瓦片行列号的范围。

步骤2: 计算瓦片的加载优先级。确定单张瓦片加载优先级的主要依据是: 瓦片中心点与视点的距离,距离越小,绘制的优先级就越高。依据步骤1中的公式可得到以下公式:

$$f(x_{\text{tile}}) = \text{lon} = \frac{x_{\text{tile}}}{n} \times 2\pi - \pi; \quad (4)$$

$$g(y_{\text{tile}}) = \text{lat} = \arctan(\sinh(\pi \times (1 - 2 \times \frac{n - y_{\text{tile}}}{n}))). \quad (5)$$

假设瓦片的行号为 x , 列号为 y , 则瓦片的中心点坐标经纬度 CenterLon 、 CenterLat 分别可由以下公式求出:

$$\text{CenterLat} = \frac{g(y) + g(y+1)}{2}; \quad (6)$$

$$\text{CenterLon} = \frac{f(x) + f(x+1)}{2}. \quad (7)$$

求出瓦片的中心点经纬度坐标后,再转化为三维空间坐标;根据三维空间坐标系两点间距离的运算公式,求出瓦片中心点与视点的距离,然后将瓦片按距离大小从小到大排序,便得出了一个瓦片加载优先级队列。

步骤3: 按照瓦片加载的优先级进行任务分配。将所有瓦片的数据处理任务,按照瓦片加载优先级分配给多个线程并行处理。任务分配时,将所有待处理任务,按照瓦片加载优先级从大到小依次分配给各个线程进行处理。假设负责数据处理的线程总数为4,具体分配方法如图3所示。

从步骤2得出的瓦片加载优先级队列中,按优先级从高到低得到待处理瓦片,依次分配给各个线程。设 Tile_k 为瓦片加载优先级队列中瓦片,则第 m 个线程中待处理瓦片队列为: $\{\text{Tile}_{4k+m}\}$

($k=0,1,2,\dots$),这就保证了每个线程中优先级较高的瓦片能够优先得到处理。

步骤4: 执行数据处理。任务分配完成后,各个线程开始执行数据处理任务。数据处理任务除了进行高程数据的插值拉伸、生成顶点、计算顶点索引和纹理映射之外,还需要读取写队列的状态,控制两个缓冲队列进行交换。数据在单个线程上的处理过程如下。

(1) 从待处理瓦片队列中获取原始数据,进行拉伸、插值等处理。

(2) 判断当前写队列是否已满,如果队列已满,执行(3);如果队列未满,执行(4)。

(3) 通过原子操作更改读写队列状态标识符,控制读写队列交换,返回(2)。

(4) 将处理完毕的数据写入写队列中,并判断待处理瓦片队列的状态,如果待处理瓦片队列为空,结束;否则,返回(1)。

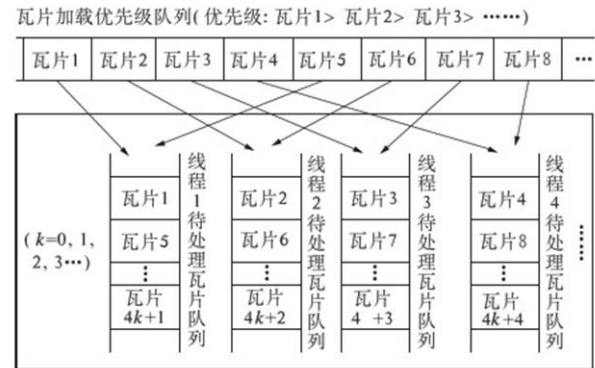


图3 基于优先级的任务分配

Fig.3 Task allocation based on priority

步骤5: 地形绘制。数据处理完毕后,渲染绘制模块利用处理完毕的数据生成地形瓦片模型,并将生成地形瓦片模型绘制到主界面中,这个过程同样采用并行的方式进行,但由于主界面所在的主线程不能被其他线程调用,所以,在三维场景中加载地形瓦片模型必须采用异步的方式。笔者利用 WPF 中 Dispatcher 对象进行异步调用。地形在单个线程上的绘制过程如下:

(1) 判断当前读队列是否为空,如果读队列为空,则执行(2);如果不为空,则执行(3)。

(2) 通过原子操作更改读写队列状态标识符,控制读写队列进行交换,返回(1)。

(3) 获取处理完毕的数据,生成地形瓦片模型,并加载到场景中,将已加载瓦片数目加1。

(4) 当已加载的瓦片数目与待加载的瓦片总

数目相同时,完成地形绘制;否则,结束当前任务。

3 实验分析

在 Visual Studio 2012 的开发环境下利用 WPF 实现目标,并在硬件配置为 Intel(R) Core(TM) i7-2600 3.40GHz(8 CPUs),4G RAM, GeForce GT 420 的计算机上进行测试。实验数据为北京昌平地区的 SRTM(Shuttle Radar Topography Mission)数据和 SAR 影像数据,其中,SRTM 数据的分辨率为 90 m,单个数据的像素尺寸为 1 024 × 1 024。纹理图像采用相同地区的 SAR 影像数据制作,图像尺寸为 19 132 × 15 314,原始大小为 279 MB。在进行实验之前,两种数据均已按照 Google Map 的标准进行了瓦片金字塔切分,单张瓦片的大小为 256 × 256。

3.1 确定最佳读、写线程数

为了确定最佳读、写线程数,以生成由 100 块地形瓦片模型组成的三维地形场景为目标,设置缓冲队列长度为 100 进行实验,每个平均值均由 15 次测量得出。具体实验步骤如下:

步骤 1:确定数据处理的最佳线程数。在不同的线程数下进行数据处理测试,记录每个线程数目下处理时间的平均值,令渲染绘制的线程数目为 1,测试结果如表 1 所示。从表 1 可以看出,在线程数目为 8 时数据处理的平均时间达到最小。为了得到最佳的处理速度,实验时采用 8 个线程对数据进行处理为最佳。

表 1 不同写线程下数据处理的平均时间

Tab. 1 Average time of data processing under different write threads

线程数	1	2	3	4	5
平均时间/ms	537.3	527.3	478.6	475.6	447.1
线程数	6	7	8	9	10
平均时间/ms	449.7	446.6	433.8	455.3	459.5

步骤 2:确定渲染绘制的最佳线程数。指定数据处理的线程数目为 8,记录在不同渲染绘制线程数目下处理时间的平均值,通过对比,最终确定最佳的渲染绘制线程数,实验结果如表 2 所示。

表 2 不同读线程数目下渲染绘制的平均时间

Tab. 2 Average time of rendering under different read threads

线程数	1	2	3	4	5
平均时间/ms	445.8	432.3	451.0	457.6	497.3

由表 2 可以看出:当渲染绘制线程数目超过

2 个后,处理时间开始增加,因此,将渲染绘制线程的数目设置为 2。

步骤 3:对比实验。按照以上两个步骤得到的最佳线程数目,建立双缓冲队列方法的实验场景,并与单线程和多线程单缓冲区两种方法进行对比实验,3 个实验场景如表 3 所示。

场景 1、2、3 分别代表:单线程、多线程单缓冲区以及多线程双缓冲区为对每个场景进行了 15 次测试,获得各个实验场景下生成三维地形所需的平均时间:场景 1 为 3 374.8 s,场景 2 为 790.5 s,场景 3 为 432.3 s。

表 3 对比实验场景

Tab. 3 Scene of contrast experiment

参数	场景 1	场景 2	场景 3
数据处理线程数	1	8	8
渲染绘制线程数	1	2	2
缓冲队列容量	100	100	100
加载瓦片总数	100	100	100

可以得出:在大规模地形绘制中,采用双缓冲队列方法的处理速度,约是单线程方法的 7.8 倍,是多线程单缓冲队列的 1.83 倍。

3.2 对比分析

为了验证本文方法在处理大规模地形数据时的效率,选择与文献[7,10]中提出的两种传统 LOD 方法以及 Mipmap 方法进行对比。其中,文献[7]提出了一种基于四叉树孤立分割和屏幕误差的地形 LOD 算法;文献[10]提出了一种 3D_DP 和 Quad_TIN 支持下的大规模地形自适应 LOD 算法,实验结果如表 4 所示。

表 4 实验结果对比

Tab. 4 Comparison of experimental result

加载地形瓦片块数	所采用方法	绘制三角形个数	单帧绘制时间/ms
129	文献[7]方法	84 611	2 751.0
	本文方法	580 500	597.2
100	Mipmap 方法	450 000	3 162.0
	本文方法	450 000	432.3
44	文献[10]方法	34 602	3 483.0
	本文方法	198 000	197.5

从表 4 可以看出,在一次性加载大量地形瓦片时,本文方法在绘制时间上要优于 Mipmap 方法、文献[7]方法和文献[10]方法,这说明本文方法能够在保证地形模型细节的前提下,显著提升海量地形数据的处理速度。在实际应用中,当对三维瓦片模型的展示细节要求较高、或需要频繁重

新构建三维场景时,本文方法更有优势.

4 结论

针对在大规模地形绘制过程中硬件的性能优势得不到充分利用的状况,提出了一种基于双缓冲队列的海量地形数据并行处理方法.该方法将瓦片的绘制过程分解为数据处理以及渲染绘制两个过程,将读、写操作分隔开来,减少了 CPU 与 GPU 的空闲时间.在对读、写两个过程进行并行处理的同时,设计了两个缓冲队列,分别负责暂存用于读入和写出的数据,这不仅能够充分发挥多核处理器的性能,而且能够最大限度地减少线程间同步所浪费的时间;在数据处理时也考虑了瓦片加载的优先级,从而根据优先级进行任务分配,提升了用户体验.实验表明,该方法能够显著提升海量地形数据处理速度,为海量地形数据处理提供了新的思路.后续研究将考虑把本文的方法与传统 LOD 的方法相结合,以达到更好效果.

参考文献:

- [1] 姚凡凡,梁强,许仁杰,等. 基于 Vega Prime 的三维虚拟战场大地形动态生成研究[J]. 系统仿真学报,2012,24(9): 1900-1904.
- [2] 闫佳,闫枫. 基于 XNA 的地理信息系统的研究与实现[J]. 测绘与空间地理信息,2014,37(11): 152-154.
- [3] 龚桂荣,杜莹,欧阳峰. 地形金字塔中地物模型的空间划分及层级索引研究[J]. 测绘科学技术学报,2014,31(2): 198-202.
- [4] 李建勋,郭莲丽,李杨,等. 面向瓦片金字塔的层深确定与投影变换方法[J]. 计算机应用, 2014, 34(9): 2683-2686.
- [5] 应申,靳凤攒,李霖,等. 基于 ArcGIS Engine 的矢量数据分层分块技术研究[J]. 测绘地理信息,2014,39(6): 50-53.
- [6] 胡鹏昱,王晓军. 基于 Geometry Clipmap 算法的大规模地形可视化研究[J]. 计算机应用与软件, 2012,29(7): 87-90.
- [7] 张俊峰,姚志宏. 基于四叉树孤立分割和屏幕误差的地形 LOD 算法[J]. 西南交通大学学报,2013,48(4): 666-671.
- [8] HEIDRICH W, SLUSALLEK P, SEIDEL H P. Real-time generation of continuous levels of detail for height fields [C]//Proc Winter School of Computer Graphics'98. Plzen: Science Press,1998: 315-322.
- [9] TURNER B. Real-time dynamic level of detail terrain rendering with roam. (2000-04-03) [2015-02-02] [EB/OL]. http://www.gamasutra.com/view/feature/131596/realtime_dynamic_level_of_detail_.php.
- [10] 张俊峰,孙大鹏,许德合. 3D_DP 和 Quad_TIN 支持下的大规模地形自适应 LOD 算法[J]. 地理与地理信息科学,2014,30(3): 29-32.
- [11] 时钢. 基于 Mipmap 的大规模地形绘制算法与仿真[J]. 计算机仿真,2015,32(2): 270-274.
- [12] 刘浩,曹巍,赵文吉,等. 面向大规模地形的瓦片调度与实时绘制算法[J]. 计算机科学, 2013, 40(6A): 120-124.
- [13] 杨秀峰,靳海亮,臧文乾. 基于 GPU 并行处理的地形三维重建技术研究[J]. 江西科学,2014,32(1): 22-25.
- [14] 于卫东. 三维地理空间环境重建与绘制技术研究[D]. 郑州: 解放军信息工程大学地理空间信息学院, 2012.

Double - Buffered Queue - Based Parallel Processing Algorithm for Massive Terrain Dataset

CHEN Xiaopan¹, QU Jiantao^{1,2}, ZHAO Yameng², WANG Peng^{1,2}, CHEN Yulin¹

(1. College of Computer and Information Engineering, Henan University, Kaifeng 475004, China; 2. Institute of Remote Sensing and Digital Earth, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100012, China)

Abstract: When dealing with massive terrain data, the advantage of hardware performance can't be fully utilized. This has become a bottleneck, which restricts the speed of massive terrain tiles rendering. This paper analyzes the key factors that affect large-scale terrain rendering speed, and proposes a parallel algorithm for massive terrain data processing. The algorithm adopts double buffer queues and divides large scale terrain rendering into two parallel processing which includes data processing and rendering. The two buffer queues are responsible for data reading and writing operations in turn. The loading priority of terrain tiles is considered and tasks are allocated based on the priority. The experimental results show that this approach improves the speed of rendering massive terrain tiles greatly.

Key words: massive terrain data; double buffer queue; parallelization; large-scale terrain rendering; tile load

文章编号: 1671-6833(2016)03-0011-05

基于自适应 Mel 滤波器组的 MFCC 特征提取的 SOC 设计

陶佰睿^{1,2}, 郭 琴¹, 苗凤娟^{1,2}, 李青龙¹

(1. 齐齐哈尔大学 通信与工程学院, 黑龙江 齐齐哈尔 161006; 2. 中国科学院 上海技术物理研究所, 上海 200083)

摘 要: 说话人声纹身份认证技术中的关键是特征参数的准确性和模式识别的速率. 为此, 对识别对象的性别予以区分, 并进行参数可自适应调整的 Mel 滤波器组设计, 即通过 Quartus II 平台在 Altera 的 DE2 系列型号为 EP2C35F672C6 的开发板上完成高效率说话人声纹特征提取的 SOC(片上系统)设计. 设计具体步骤如下: 首先, 设计截止频率为 400 Hz 和 200 Hz 的低通滤波器以完成男女生基音频率的检测; 然后, 依据计算出的每一帧语音频谱的频率范围确定 Mel 滤波器组的最高频率并完成参数设计; 最后, 在 Quartus II 平台上完成 Verilog-HDL 代码设计, 并封装为 IP 核完成 SOC 设计以及编译、仿真和下载验证. 结果表明, Mel 滤波器组利用率的提高有利于提高特征参数的准确性和识别速度.

关键词: 声纹身份认证; 自适应梅尔滤波器组; 性别识别; 片上系统

中图分类号: TP391.42

文献标志码: A

doi: 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.003

0 引言

互联网的普及促进了我国信息产业的快速发展, 人们通过互联网进行日常生活和生产变得越来越便利, 但互联网本身的安全问题也引起了人们对用户个人信息安全的关注. 声纹识别相对其他生物识别技术具有语音获取便捷、易于被人们接受和准确度高优点, 而声纹特征提取的准确度和提取速度是声纹识别技术推广应用的关键^[1-3].

文献[4]针对说话人识别中梅尔频率滤波器组结构分布不均匀的问题, 在低频区域密集而在中、高频分布稀疏, 提出适用于说话人识别的改进 Mel 滤波器与 MidMel 滤波器组相结合得到两种混合特征参数. 文献[5]提出对传统的提取 Mel 频率倒谱系数(MFCC)过程中计算 FFT 这一步骤进行频谱重构, 对频谱进行噪声补偿重建, 使之具有很好的抗噪性. 文献[6]利用人类听觉模型提出一种语音感知哈希算法, 该算法对倒谱系数(MFCC)算法中每帧的滤波器数量进行控制, 得到每帧语音的自适应梅尔频率倒谱系数(MFCC). 传统提取语音特征参数中的 Mel 滤波器组

的频率范围是不可变的, 这样就会导致 Mel 滤波器组的利用率降低^[7-9]. 而笔者提出的自适应 Mel 滤波器组能够对每帧的滤波器组的频率范围进行调整.

首先, 依据男女生基音频率的不同, 设计 2 个截止频率不同的低通滤波器对识别人的性别进行区分. 其次, 考虑到每一帧的语音频谱的频率范围的不同, 为提高 Mel 滤波器组的利用率, 加快识别速度, 笔者设计的 Mel 滤波器组参数可自适应调整, 主要依据每一帧语音频谱的频率范围确定 Mel 滤波器组的最高频率来达到自适应的目的. 最后, 在 Quartus II 平台上完成 Verilog 代码编写、Modelsim 时序仿真以及板级的下载验证, 封装 IP 核完成 SOC 设计.

1 总体设计

男女生生理结构的不同决定了声音听觉特性的不同, 男生基音频率在 100 ~ 200 Hz 之间, 女生基音频率在 200 ~ 350 Hz 之间. 因此笔者设计截止频率为 400 Hz 和 200 Hz 的低通滤波器来对男女生进行区别.

收稿日期: 2015-10-04; 修订日期: 2015-12-01

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61204127); 黑龙江省自然科学基金资助项目(F201438); 黑龙江省教育厅科学技术研究项目(12541899, 12531774); 黑龙江省教育科学“十二五”规划 2014 年度课题(GBC1214089); 黑龙江省高校科技成果产业化前期研发培育资助项目(1254CGZH04)

作者简介: 陶佰睿(1972—), 男, 吉林洮南人, 齐齐哈尔大学教授, 博士, 主要从事集成电路设计和声纹识别技术研究, E-mail: Tbr_sir@163.com.

同一个说话人的每一帧的语音频谱是有所区别的,传统的 Mel 滤波器组的频带范围为 0 ~ 4 000 Hz,并不是针对每一帧的语音频谱设计的,这样会造成传统 Mel 滤波器组中的个别滤波器并没有被使用.因此,笔者将依据每一帧语音频谱的

频率范围确定 Mel 滤波器组的最高频率,不但可使 Mel 滤波器组的参数进行自适应调整,而且提高了 Mel 滤波器组的利用率,对声纹识别率的提高有很大作用.总设计流程图如图 1 所示.

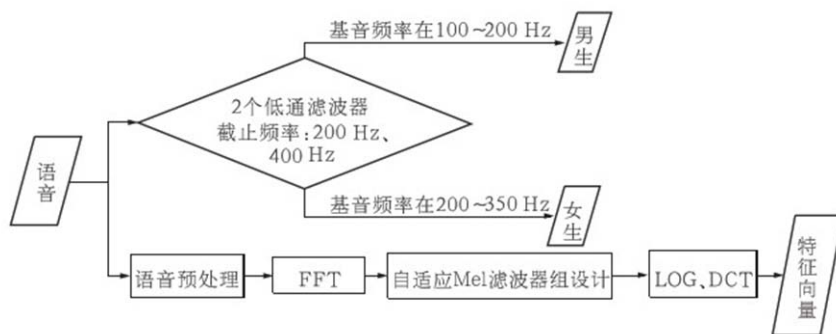


图1 总体设计流程图

Fig.1 Flow chart of overall design

2 低通滤波器设计

2.1 参数设计

在 Matlab R2014a 的 Fdatool 界面中设置响应类型为低通滤波器,使用汉宁窗进行设计,采样频率设置为 8 000 Hz,截止频率分别设置为 400 Hz 和 200 Hz,得到时域图分别如图 2 和图 3 所示,分别得到 2 组滤波器系数,都为 12 阶,见表 1 所示.

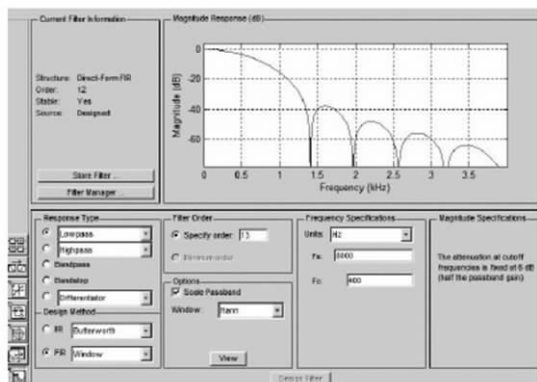


图2 截止频率为 400 Hz

Fig.2 Cutoff frequency of 400 Hz

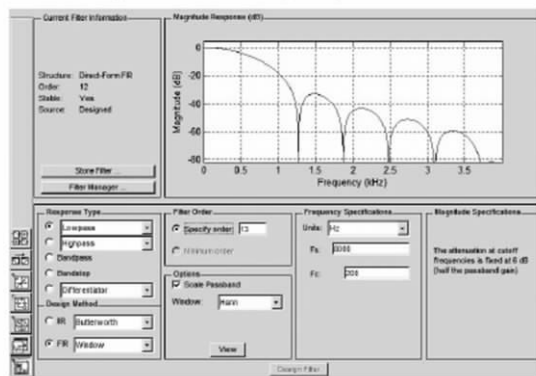


图3 截止频率为 200 Hz

Fig.3 Cutoff frequency of 200 Hz

表1 2组滤波器系数

Tab.1 Filter coefficients of two sets

序号	第1组	第2组	序号	第1组	第2组
1	0.005	0.007	7	0.165	0.154
2	0.025	0.031	8	0.141	0.136
3	0.059	0.065	9	0.102	0.103
4	0.102	0.103	10	0.059	0.065
5	0.141	0.141	11	0.025	0.031
6	0.165	0.154	12	0.005	0.007

2.2 Verilog HDL 代码设计

由低通滤波器的传递函数可以得到当滤波器的阶数为 12 时的表达式,可通过式(1)得出:

$$y(n) = c_0 \cdot x(n) + c_1 \cdot x(n-1) + \dots + c_{11} \cdot x(n-11). \quad (1)$$

式中: c_0 等为滤波器的抽头系数; n 为时刻; x 为序列; y 为滤波器输出.

由表达式(1)可得出,滤波器的输出是由序列 x 中的 12 个序列点分别与对应的 12 个系数进行相乘再累加的结果.因此编写 Verilog 代码,包括乘法模块、加法模块、控制模块.综合后的 RTL 视图如图 4 所示.图中端口 A 中存放的是序列 x ,端口 B 中存放的是 12 组系数.

3 自适应 Mel 滤波器组设计

3.1 Mel 滤波器组的频带设计

采样率设置为 8 kHz,量化位数设置为 16 bit,由于语音的短时平稳性,帧长设置为 20 ms.对每一帧语音信号进行 FFT 变换,可以得到每一帧语音序列的频谱,不同帧的语音频谱应该是不相同的.因此,计算每一帧语音频谱作为 Mel 滤波器组的最高频率值.设计流程如图 5 所示.

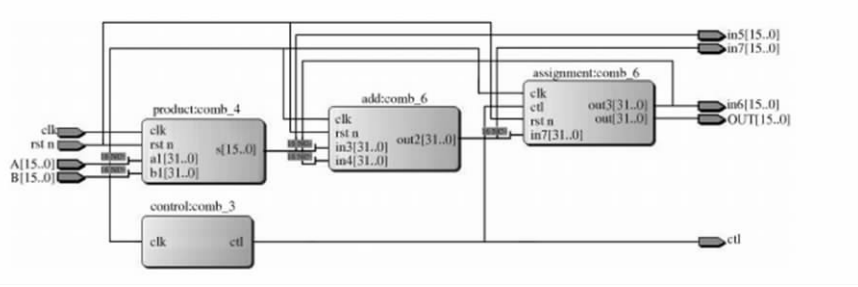


图4 FIR 的 RTL 视图

Fig.4 RTL view of FIR



图5 自适应 Mel 滤波器组的设计流程

Fig.5 Design flow of adaptive Mel filter banks

3.2 Verilog HDL 代码设计

MFCC 是基于人耳的听觉特性的一种参数,可通过式(2)得出.根据 Zwicker 的研究可知,临界频率带宽随着频率的变化而变化,并与 Mel 频率的增长一致,在 1 000 Hz 以下大致呈线性分布,带宽为 100 Hz 左右;在 1 000 Hz 以上呈对数增长.

$$\text{Mel}(f) = 2595 \log_{10}(1 + f/700). \quad (2)$$

式中: f 为线性频率, Hz; $\text{Mel}(f)$ 为 Mel 频率, mel.

Mel 滤波器组的频率响应函数表达式可通过式(3)得出:

$$W_l(k) = \begin{cases} \frac{k - o(l)}{c(l) - o(l)}, & o(l) \leq k \leq c(l); \\ \frac{h(l) - k}{h(l) - c(l)}, & c(l) \leq k \leq h(l). \end{cases} \quad (3)$$

式中: $o(l)$ 为第 l 个三角形滤波器的上限截止 Mel 频率, mel; $c(l)$ 为第 l 个三角形滤波器的中心 Mel 频率, mel; $h(l)$ 为第 l 个三角形滤波器的下限截止 Mel 频率, mel; k 为在 $o(l)$ 和 $c(l)$ 之间的整数值.

由表达式(3)可看出,每个三角形滤波器都是对称的,选择右半边的表达式,绘制成图形如图6所示.

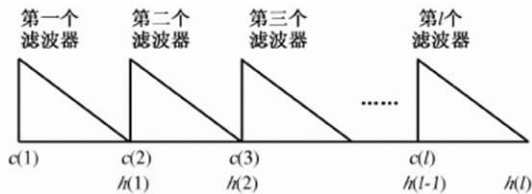


图6 三角形滤波器组波形

Fig.6 Waveforms of triangle filters

采样率 f_s 设置为 8 000 Hz, 滤波器个数 p 为 18, FFT 变换点数 n 为 160, f 为一帧语音频谱的频率范围, f 决定了 Mel 滤波器组的最高频率, Mel 滤波器组的输出用 $W1, W2, \dots, Wl$ 等表示, inc 表示下限截止 Mel 频率与中心 Mel 频率的间隔. 设计流程如图7所示.

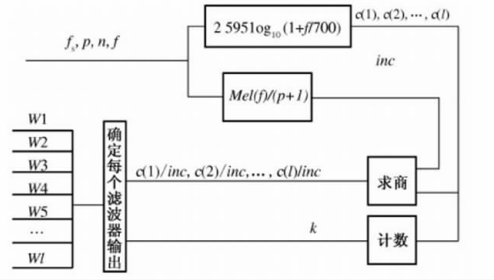


图7 Mel 滤波器组的设计流程

Fig.7 Design flow of Mel filter banks

4 编译仿真与下载验证

4.1 Modelsim 时序仿真

编写 testbench 文件并输入激励源,调用 Modelsim 进行时序仿真.当每帧语音的频谱范围小于传统 Mel 滤波器组的梅尔频率 2 146 mel 时,在相同的时间间隔内自适应滤波器组中的最后一个滤波器实现输出的时间会远小于传统三角形滤波器组中的最后一个滤波器实现输出的时间.随机选取第 10 帧语音序列,得到自适应 Mel 滤波器组和传统 Mel 滤波器组输出分别见图8和图9.时间间隔为 2 μs 内的自适应 Mel 滤波器组的最后一个滤波器在接近 960 ns 时输出为 0,而传统 Mel 滤波器组在接近 1.8 μs 后才输出为 0.可以看出,传统三角形滤波器组中的个别滤波器是不需要被使用的,而自适应三角形滤波器组可以提高滤波器的利用率.

4.2 MATLAB 性能仿真

为验证特征参数的准确性,利用 Matlab 中自带的神经网络工具箱,设计一个根据 10 个人的不同语音帧的特征参数来确定出其中的一个人的神

神经网络系统. 神经网络的输入数据为特征参数, 本文中包括 2 类, 传统 Mel 滤波器组提取的特征参数和自适应 Mel 滤波器组提取的特征参数, 目标

输出为 0 或 1, 0 代表不是该人, 1 代表是此人. 最终得到的误差率如图 10 和 11 所示. 图中, 误差 = 预测值 - 实际值.

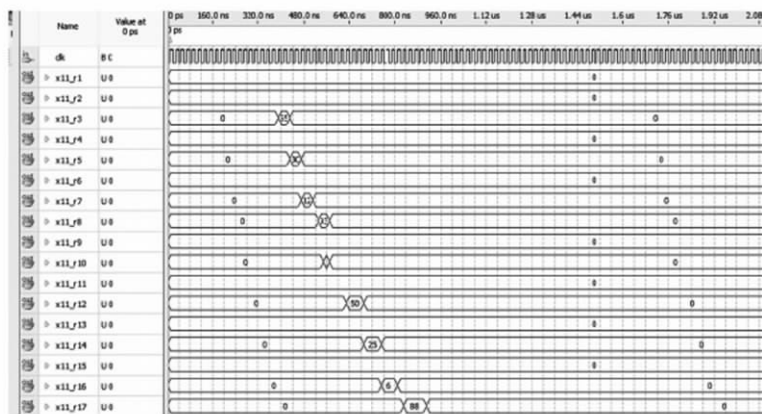


图 8 对应第 10 帧语音的自适应 Mel 滤波器组的 Modelsim 仿真
Fig. 8 Modelsim simulation of adapted Mel filter banks corresponding to the first 10 frame voice

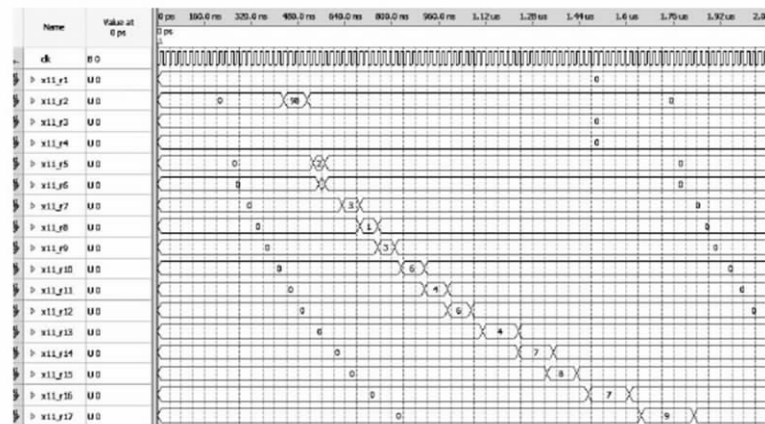


图 9 对应第 10 帧语音的传统 Mel 滤波器组的 Modelsim 仿真
Fig. 9 Modelsim simulation of traditional Mel filters corresponding to the first 10 frame voice

由图 10 和图 11 可知, 利用自适应 Mel 滤波器组提取出的特征参数相对传统 Mel 滤波器组进行识别时, 误差率更小, 准确性得到了提高.

4.3 编译

在 QUARTUS II 平台中编写 Verilog 代码, 在时序仿真、综合之后进行编译, 消耗的硬件资源如图 12 所示.

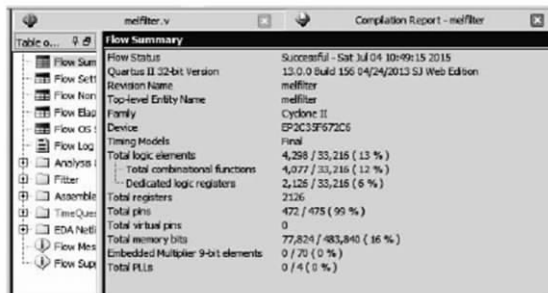


图 12 编译报告
Fig. 12 Compiled report

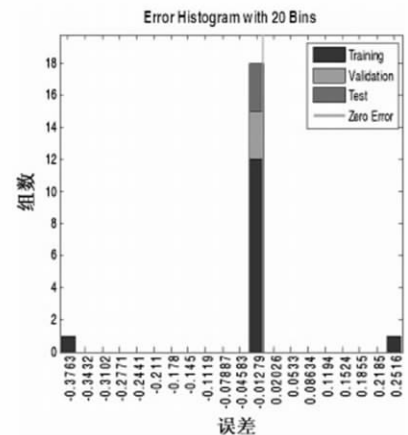


图 10 自适应滤波器的误差
Fig. 10 Error of adapted filters

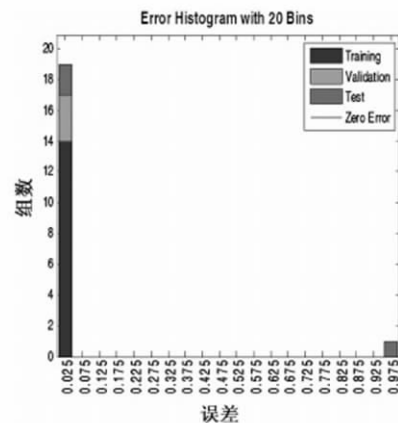


图 11 传统滤波器的误差
Fig. 11 Error of traditional filters

4.4 生成 IP 核与下载验证

利用 SOPC Builder 的自定义 IP 技术, 在 QUARTUS II 平台添加 VERILOG 文件、CPU、时钟、定时器等组件, 生成 IP 核, 如图 13 所示.

Item	Component	Module Name	Description	Clock	Base	End
✓	cpe	None	None			
✓	instruction_master	Avion Memory Mapped Master		clk_50	0x00000000	0x00000000
✓	data_master	Avion Memory Mapped Master		clk_50	0x00000000	0x00000000
✓	irq_master	Avion Memory Mapped Master		clk_50	0x00000000	0x00000000
✓	flash	Flash Memory Interface (CFI)		clk_50	0x00000000	0x00000000
✓	adram	Avion Memory Mapped Slave		clk_50	0x00000000	0x00000000
✓	sdram	Avion Memory Mapped Slave		clk_50	0x00000000	0x00000000
✓	lcd	Character LCD		clk_50	0x00000000	0x00000000
✓	control_slave	Avion Memory Mapped Slave		clk_50	0x00000000	0x00000000
✓	timer	Interval Timer		clk_50	0x00000000	0x00000000

图 13 SOPC Builder 组件
Fig. 13 Component of SOPC Builder

5 结束语

根据每一帧语音频谱的频率范围来确定每一个 Mel 滤波器组的频带范围,可以有效地提高 Mel 滤波器组的利用率,避免了有些频段的滤波器未被使用情况的发生,有助于提高特征参数的准确性以及识别率,最后通过了硬件验证. 因此,利用 IP 核技术完成 SOC 设计,可方便模块调用,以及减少硬件资源的使用,提高设计的开发速度.

参考文献:

- [1] HIRAYAMA N, YOSHINO K, ITOYAMA K, et al. Automatic speech recognition for mixed dialect utterances by mixing dialect language models [J]. IEEE ACM Transactions on audio speech and language processing, 2015, 23(2): 373 – 382.
- [2] 陈晨, 胡贝贝. 基于语音识别技术的机载短波应急通信 [J]. 电讯技术, 2014(01): 6 – 11.
- [3] DUFOUR R, Estève Y, Deléglise P. Characterizing and detecting spontaneous speech: application to speaker role recognition [J]. Speech communication, 2014, 56(1): 1 – 18.
- [4] 黄锐, 陆安江, 张正平. 一种改进型的 MEL 滤波器混合特征参数提取方法研究 [J]. 通信技术, 2014(12): 1388 – 1391.
- [5] 胡政权, 曾毓敏, 宗原, 等. 说话人识别中 MFCC 参数提取的改进 [J]. 计算机工程与应用, 2014(7): 217 – 220.
- [6] 黄羿博, 张秋余, 袁占亭, 等. 融合 MFCC 和 LPCC 的语音感知哈希算法 [J]. 华中科技大学学报(自然科学版), 2015, 43(2): 124 – 128.
- [7] SHARMA R P, FAROOQ O, KHAN I. Wavelet based sub-band parameters for classification of unaspirated hindi stop consonants in initial position of cv syllables [J]. International journal of speech technology, 2013, 16(3): 323 – 332.
- [8] ZENG F Z, ZHOU H. Speaker recognition based on a novel hybrid algorithm [J]. Procedia engineering, 2013, 61: 220 – 226.
- [9] MAHMOOD A, ALSULAIMAN M, MUHAMMAD G. Automatic speaker recognition using multi-directional local features (mdlf) [J]. Arabian journal for science and engineering, 2014, 39(5): 3799 – 3811.

Design of MFCC Feature Extraction Based on Adaptive Mel Filter Banks for SOC Application

TAO Bairui^{1,2}, GUO Qin¹, MIAO Fengjuan^{1,2}, LI Qinglong¹

(1. Computing Center, Qiqihar University, Qiqihar 161006, China; 2. National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Shanghai 200083, China)

Abstract: The accuracy of characteristic parameter and pattern recognition rate among speaker voiceprint authentication technologies are important. In this paper, adaptive Mel filter banks are designed after the recognition of the gender, and the SOC (system-on-chip) design of high efficiency speaker voiceprint feature extraction is completed on the EP2C35F672C6 development board of Altera's DE2 series. First of all, two low-pass filters cutoff frequency of 200 Hz and 400 Hz are designed to complete the pitch frequency detection of male and female students. Then, the parameters of Mel filter banks are calculated by the highest frequency deduced from the frequency range of speech spectrum. Then, Verilog-HDL code encapsulated as IP core for SOC design, compilation, simulation, and download authentication are finished on the Quartus II platform. The results show that adaptive Mel filter banks can improve both the accuracy of characteristic parameters and the speed of recognition.

Key words: voiceprint authentication; adaptive mel filter banks; gender recognition; SOC

文章编号: 1671-6833(2016)03-0016-05

基于 WordNet 的本体查询方法研究

陈淑鑫, 张凌宇

(齐齐哈尔大学 计算中心, 黑龙江 齐齐哈尔 161006)

摘要: 不同的本体之间普遍存在着很多语义互操作的问题, 如: 语义冲突和结构异构, 这些问题严重地影响了本体之间的知识共享和重用; 同时也给本体查询服务带来了很大的困难, 为此, 提出一种基于 WordNet 的本体查询框架 OQ-WordNet. 该框架首先使用语义词典库 WordNet 来精确地计算不同本体(源本体)之间概念的相似度; 然后通过本体集成和本体映射方法为所有源本体生成一个目标本体, 并建立它们之间的语义映射关系; 最后 OQ-WordNet 采用本体查询语言 SPARQL 来实现本体之间的查询功能.

关键词: 本体; WordNet; 本体查询; 本体映射; 本体集成

中图分类号: TG335.58 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.004

0 引言

在实现不同信息系统之间的知识共享或者交换的过程中, 很多研究者都将本体^[1]视为一种重要的知识库模型. 由于不同的本体构建者对相关领域知识的理解是不同的, 而且他们不可能使用完全相同的概念来组织本体内的知识, 因此不同本体之间普遍存在异构的现象. 本体之间的异构性会严重地影响本体查询方法^[2]的性能, 从而导致知识平台无法提供有效的查询检索服务. 为此, 需要在设计本体查询方法的过程中, 引入解决本体异构性方面的研究(如: 本体映射和集成), 以解决异构本体之间的查询问题.

为了实现异构本体之间的查询, 很多研究者都建议构建一个标准的本体知识库框架^[3], 并在此框架下提供一系列可靠的本体查询理论基础, 以供本体查询任务作为参考. 还有些研究者更专注于对本体集成的研究^[4], 他们建议先使用本体映射方法^[5]为异构本体先建立语义关联, 然后将这些本体集成到一个本体中, 最后在这个本体中实现本体查询过程中所需要的各种行为.

对于很多领域来说, 知识以及知识结构的更新速度是非常快的. 这使得构建以及维护一个上层领域本体集合变得非常困难. 为此, 笔者将本体

映射和集成方法引入到本体查询过程中, 并提出一种基于 WordNet 的本体查询方法. 该方法首先使用 WordNet 语义词典库来提高计算异构本体之间相似度的精确度, 然后根据相似度的计算结果来建立本体之间的映射关系, 即为语义相同或者相似的概念建立映射关联, 并且将异构的本体(源本体)集成到一个共享的本体(目标本体)中, 最后根据目标本体与源本体之间的映射关系, 实现本体查询的功能.

1 相关工作

目前, 很多知识工程领域的研究者都在关注消除本体异构性的方法. 为此, 笔者针对本体映射、本体集成和本体查询展开了深入的研究. 对于本体映射的研究来说, 很多研究者都采用多种类型的相似度计算方法来提高映射的查全率和查准率. SM-Context^[6]在使用多种相似度计算方法的时候还将概念周围的语言环境作为计算的一个重要因素, 从而提高了语义映射的精确度. RI-MOM^[7]是使用了一种风险最小化模型来建立本体映射. 在本体映射的基础上, 很多研究者通过本体集成来有效地整合本体之间共享的、冗余的知识信息. 文献[8]对各类本体集成模式进行了全面的研究. 文献[9]提出一种适用于生物工程领

收稿日期: 2015-10-27; 修订日期: 2015-12-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61204127); 黑龙江省自然科学基金资助项目(F201334, F2015024); 齐齐哈尔大学青年资助项目(2014k-M08); 黑龙江省高校科技成果产业化前期研发培育项目(1254CGZH04).

作者简介: 陈淑鑫(1978—), 女, 黑龙江哈尔滨人, 齐齐哈尔大学副教授, 主要从事人工智能、数据挖掘及语义 Web 方面的研究, E-mail: shuxinfrend@126.com.

域内本体的集成方法 SAMBO. 文献 [10] 提出了一种基于视图的本体集成框架 OIS-View, 并将本体集成任务交给多个视图模块来完成.

关于本体查询的研究一直是本体研究领域内的一项重大课题. 文献 [11] 将关系数据库中的数据表转换成 RDF 数据形式, 并使用 SPARQL 来间接地查询数据库中的数据. 文献 [12] 将 SPARQL 查询转换成 SQL 查询, 并实现关系数据库的查询功能. 文献 [13] 使用斯坦福大学开发的 Parser 分析器来解析用户的自然语言查询, 然后使用 SPARQL 实现本体查询. 文献 [14] 使用 SPARQL 解决了海量 RDF 的查询问题.

2 背景知识

2.1 本体定义

在计算机研究领域内, 本体是一个明确的、形式化的、共享的概念模型, 可被定义成一个四元组 $O = (C, P, I, Z)$.

C : 概念集合. C 中的概念也可称为类, 由三元组构成: $C = (c, A^c, V^c)$. 其中, c 是概念的名称; A^c 是描述概念的属性标识集合; V^c 是属性域集合.

P : 属性集合. 描述概念的特征, 由两部分组成: 属性标识集合 A^c 和属性值集合 V^c . 其中 A^c 包含了属性所有的标示符; V^c 包含了属性的所有取值.

I : 实例集合. 实例可由集合 A^c 中的属性以及 V^c 中的属性值来描述, 即 $I = (id, v)$. 其中, id 是集合 A^c 中的具体元素名称; v 是集合 V^c 中具体的值.

Z : 公理集合. 约束概念、属性和实例之间的隶属关系以及表示形式.

2.2 相似度

假设 x, y, z 是实体, $\text{sim}(x, y)$ 的值表示 x 和 y 之间的相似度, 那么相似度的形式化定义如下:

- ① $\text{sim}(x, y) \in [0, 1]$;
- ② $\text{sim}(x, y) = 1$ 表示 x 和 y 等价 ($y = x$);
- ③ $\text{sim}(x, y) = 0$ 表示两个对象不相交, 即它们之间没有共同特征;
- ④ $\text{sim}(x, y) = \text{sim}(y, x)$, 相似度的对称性;
- ⑤ $\text{sim}(x, z) \leq \text{sim}(x, y) + \text{sim}(y, z)$, 相似度满足三角不等式.

3 基于 WordNet 的本体查询框架

为了查询不同本体之间的数据, 笔者提出了

一种基于 WordNet 的本体查询框架 OQ-WordNet (Ontology Query Based on WordNet). 该框架是由多个功能模块组成, 如图 1 所示.

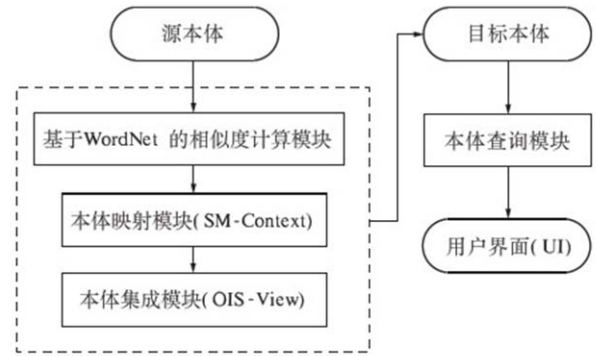


图 1 本体查询框架 OQ-WordNet

Fig. 1 The ontology query framework: OQ-WordNet

首先, OQ-WordNet 使用语义词典库来计算不同本体(源本体)的概念之间相似度; 其次, 使用本体映射模块来建立本体之间的语义关联; 再次, 使用本体集成模块, 将这些本体之间共享的、可重用的、冗余的概念集成到一个标准本体, 称之为目标本体; 最后, 使用查询模块(SPARQL 模块), 以问答或者提示的方式来辅助使用者来生成查询表达式, 并完成在目标本体和源本体中查询数据的操作.

3.1 基于 WordNet 的相似度计算

在现实中, 本体中的大多数概念都是由多个词组成, 而这些单词在 WordNet 中被称之为“原子概念”. 因此, 为了计算概念之间的相似度, 需要依次比较原子概念之间的相似性. 使用 WordNet 词典库来计算原子概念之间的相似度时, 可以测量它们在 WordNet 中的深度, 以及它们最小公共概念的深度, 然后再将原子概念之间的相似度定义成它们最小公共祖先的信息量.

从宏观上来说, 如果两个原子概念存在于 WordNet 中同一个同义词集合, 那么它们相似的可能性很大. 例如, 单词 learner 出现在两个名词性的同义词集合 { learner, scholar, assimilator } 和 { apprentice, learner, prentice }; 单词 student 出现在两个名词性的同义词集合 { student, pupil, educate } 和 { scholar, scholarly person, bookman, student }. 这样, scholar 是 student 同义词集合和 learner 同义词集合的公共词语, student 和 learner 之间存在着相似关系. 如果我们继续在 student 同义词集合和 learner 同义词集合中查找同义词, 与 student 和 learner 相似的词语的数量将会很大, 这

意味着 student 和 learner 之间的相似度很大. 根据上面的分析, 给出计算本体中概念之间的相似度计算公式, 如下所示:

$$\text{sim}(C, C') = \frac{\sum_{i=1, j=1}^{m, n} \text{sim}(w_i, w'_j)}{\max(\text{size}(C), \text{size}(C'))}. \quad (1)$$

其中, 概念 C 和 C' 的原子概念分别为 $\{w_1, w_2, \dots, w_m\}$ 和 $\{w'_1, w'_2, \dots, w'_n\}$, 函数 size 返回原子概念集合的大小, $1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n$. 如果原子概念 w_i 和 w'_j 在一个同一词集合中, 它们之间的相似度为 1; 否则可以使用信息量来计算它们之间的相似度, 详见公式 (2). 其中函数 LCA 可以找到 WordNet 中 w 和 w' 的最小公共祖先节点, 函数 IC 可以计算概念的信息量.

$$\text{sim}(w, w') = \frac{\text{IC}(\text{LCA}(w, w'))}{\text{IC}(w) + \text{IC}(w')}. \quad (2)$$

3.2 本体映射与集成

在计算概念之间相似度的基础上, 本体查询框架 OQ-WordNet 采用笔者在文献 [6] 和 [10] 中给出的本体映射 (SM-Context) 和本体集成方法 (OIS-View), 实现重新组织目标本体和源本体所包含的概念信息的任务.

3.2.1 SM-Context

为了充分地考虑概念位置对建立语义映射过程的重要性, 方法 SM-Context 使用描述逻辑来表示概念以及语境 (Context). 这样, 接下来的语义映射任务就可以通过谓词推理来完成. 图 2 给出了 SM-Context 的映射过程.

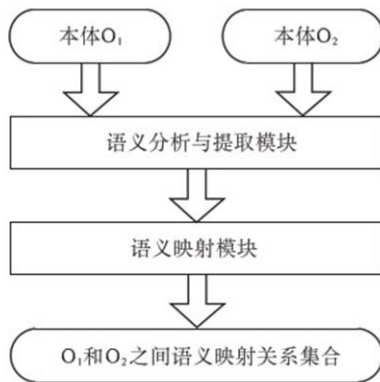


图 2 SM-Context 映射过程

Fig. 2 The mapping process of SM-Context

简要地介绍下语义映射模块建立映射关系的规则. 首先, 假设 S_i, l_i, L_i 分别是概念 c_i 的结构、名称和标签, 其中标签可能是概念的名称, 也可能是概念的内容. 那么可以给出下面的规则来建立

不同本体之间的概念关系.

(1) 当关系 $c_1 \equiv c_2$, 满足下面条件之一即可.

① $\text{sim}(c_1, c_2) = 1$;

② $\text{sim}(L_1, L_2) > 0 \ \&\& \ c_1 \cap c_2$;

③ $\text{sim}(L_1, L_2) > 0 \ \&\& \ \sup(c_1) \equiv \sup(c_2)$

父概念等价;

④ $\text{sim}(L_1, L_2) > 0 \ \&\& \ \text{sub}(c_1) \equiv \text{sub}(c_2)$

子概念等价;

(2) 当关系 $c_1 \supseteq c_2$, 满足下面条件之一即可.

① $\text{sim}(L_1, L_2) > 0 \ \&\& \ \text{sim}(S_2, S_1) = 1 \ \&\& \ \text{sim}(S_1, S_2) < 1$;

② L_1 是 L_2 的下义词 $\&\& \ \text{sim}(S_2, S_1) = 1 \ \&\& \ \text{sim}(S_1, S_2) < 1$;

③ L_2 是 L_1 的上义词 $\&\& \ \text{sim}(S_2, S_1) = 1 \ \&\& \ \text{sim}(S_1, S_2) < 1$;

(3) 当关系 $c_1 \subseteq c_2$, 同关系 $c_2 \supseteq c_1$.

3.2.2 OIS-View

方法 OIS-View 将视图概念应用于本体集成. 该方法包含 3 个视图模块: 集成视图 (IV, Integrated View)、更新维护视图 (UMV, Update Maintenance View) 和整合视图 (MV, Merged View). 图 3 给出了 OIS-View 的集成过程.

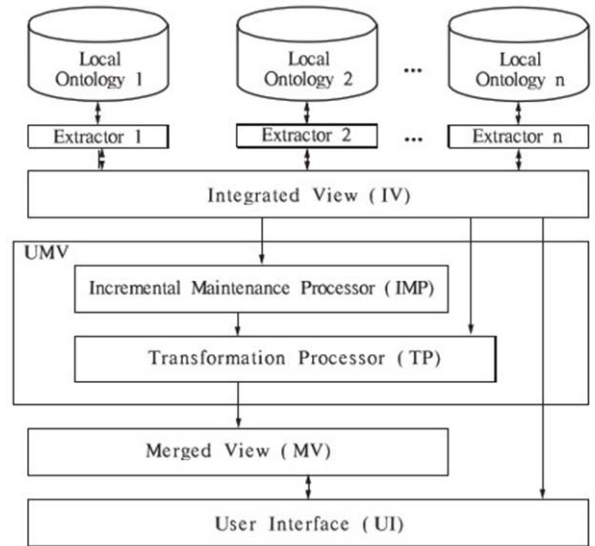


图 3 OIS-View 的集成过程

Fig. 3 The integrating process of OIS-View

在集成过程中, IV 的作用是根据映射结果从各个源本体中找出语义相同或者相似的概念. MV 统计出源本体所共享的概念集合, 并将冗余的概念合并到目标本体中. MUV 的任务则是以日志的形式记录下所有关于本体的操作, 并将修改内容返回给各个源本体, 以保证目标本体和源本体之

间的数据一致性. 在 MV 中,概念的集成规则如下所示:

- (1) 如果 $c_1 \equiv c_2$, 那么删除 c_1 ;
- (2) 如果 $c_1 \supseteq c_2 \wedge \exists c_1 \equiv c_3$, 其中 c_2 是 c_3 的子类, 那么删除 c_1 ;
- (3) 如果 $c_1 \supseteq c_2 \wedge \neg \exists c_1 \equiv c_3$, 其中 c_2 是 c_3 的子类, 那么 c_2 是 c_1 的子类;
- (4) 如果 $p_1 \cong p_2$, 那么删除 p_2 (例如: $\text{job} \cong \text{occupation}$);
- (5) 如果 $p_1 \subseteq p_2$, 那么删除 p_1 (例如: $\text{age} \subseteq \text{birthday}$).

3.3 本体查询

本体查询框架 OQ-WordNet 中的查询模块采用本体查询语言 SPARQL 来实现. 具体来说, OQ-WordNet 通过 SPARQL 来完成两个任务: ①接收并响应用户界面提出的查询请求; ②通过本体映射关系对原始查询表达式进行重写, 从而实现目标本体和源本体之间的知识查询.

SPARQL 查询是一个四元组 (Key, DS, GP, SM), 其中:

- (1) Key 是用户输入的查询关键词, 该项不能为空;
- (2) DS 表示要查询的对象, 即某个具体的本体, 如果该项为空, 则需要对目标本体以及所有的源本体进行查询;
- (3) GP 表示图模型集合, 本体内所有元素都被表示成 RDF 三元组, 即 $\langle \text{Subject}, \text{Predicate}, \text{Object} \rangle$, 这样 RDF 图可以存储于 GP 中;
- (4) SM 表示解决方案序列修饰符, 主要作用是对无序的查询结果进行重新排列.

假设, 用户使用 SPARQL 写出来的一条查询为 (Person, SO_i , $RDF-G_j$, $Order_{Age}$). 其中 SO_i 、 $RDF-G_j$ 的下标表示集合中元素的编号, $Order_{Age}$ 中的下标表示排序的字段, 那么, 框架 OQ-WordNet 可自动地解析这条查询, 定位到相应的查询目标并完成相应的查询功能.

如果查询涉及到 2 个或者 2 个以上本体时, 框架 OQ-WordNet 还需要基于本体之间的语义映射关系, 实现查询重写的功能. 以查询 (Person, $Order_{Age}$) 为例, OQ-WordNet 先根据查询关键词 Person, 从映射集合中找出相关的本体映射关系; 然后再从映射关系中找到与 Person 语义等价的概念以及概念所在的本体; 最后使用找到的概念和本体对查询进行重写. 利用重写后的查询, OQ-WordNet 可以从目标本体和源本体中找出所有与

Person 相关的 RDF 三元组, 并使用 Age 信息对这些三元组进行排序.

4 实验结果

本实验采用 OAEI (Ontology Alignment Evaluation Initiative) 所提供的数据集 conference 作为实验对象. 该数据集中共有 16 个关于“会议”的本体模型. 由于这些模型是由不同组织、机构所设计, 它们之间都存在着异构性, 这使得用户无法在多个本体之间查询知识. 为了说明的需要, 笔者先选取数据集 conference 中的两个本体 (Confious 和 OpenConf) 作为实验对象. 本体 Confious 和 OpenConf 所包含的概念数量分别为 57 和 62. 至于在其他本体之间的查询, 方法 OQ-WordNet 有着类似的性能表现, 在此就不列出具体的数据分析.

在实验的过程中, 查询关键词 (select ?) 和查询对象 (from ?) 可能有 3 种情况: 目标本体、本体 Confious 和本体 OpenConf. 因此, 笔者采用了 9 个查询语句 ($Q_1 \sim Q_9$) 来全面地检测方法 OQ-WordNet 的查询响应时间. 例如: Q_2 是以目标本体中的概念作为关键词, 本体 Confious 为查找源. 运行结果如表 1 所示.

表 1 查询的响应时间

Tab. 1 The response time of query

语句	关键词	查询对象	响应时间/ms
Q_1	目标本体	目标本体	634
Q_2	Confious	目标本体	906
...
Q_9	OpenConf	OpenConf	671

结果表明, 方法 OQ-WordNet 的时间复杂度为 $O(n^2)$. 关键词和查询对象是相同本体时, 查询相应时间大约在 600 ~ 650 ms 之间; 关键词和查询对象是不同本体时, 查询相应时间大约在 900 ~ 1 000 ms 之间.

5 结论

笔者提出了一种基于 WordNet 本体查询框架 OQ-WordNet, 该框架首先利用 WordNet 计算本体库中包含的项与待比较词语之间的语义相似度; 然后根据计算结果再完成本体映射和集成任务, 并为某一领域内的源本体生成一个目标本体; 最后, 使用 SPARQL 语言来实现该框架在目标本体和源本体之间的查询功能.

参考文献:

- [1] 张凌宇, 马志晟, 陈淑鑫. 一种基于多种类型匹配器的本体映射方法 [J]. 郑州大学学报(工学版), 2015, 36(3): 11-15.
- [2] 李韧. 基于 Hadoop 的大规模语义 Web 本体数据查询与推理关键技术研究 [D]. 重庆: 重庆大学计算机学院, 2013.
- [3] LANGE C. Ontologies and languages for representing mathematical knowledge on the semantic web [J]. Semantic web, 2012, 4(2): 119-158.
- [4] DUONG T H, NGUYEN N T, JO G S. A Method for integration of wordNet-based ontologies using distance measures [C]//Internal Conference on Knowledge-Based Intelligent Information and Engineering System, KES 2008, Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2008: 210-219.
- [5] HAASE P, HORROCKS I, HOVLAND D, et al. Optique system: towards ontology and mapping management in OBDA solutions [C]//Proceedings of the Second International Workshop on Debugging Ontologies and Ontology Mappings. New Jersey: Citeseer, 2013: 21-32.
- [6] 张凌宇, 陈淑鑫, 张新. 一种基于上下文的语义映射方法 [J]. 计算机应用研究, 2014, 31(10): 2990-2993.
- [7] LI Jianzi, TANG Jie, LI Yi, et al. RiMOM: A dynamic multi-strategy ontology alignment framework [J]. IEEE Transaction on knowledge and data engineering, 2009, 21(8): 1218-1232.
- [8] SOFIA P H, MARTINS J P. Methodology for ontology integration [C]//Proceedings of the First International Conference on Knowledge Capture. New York: ACM, 2001: 131-138.
- [9] LAMBRIX P, TAN H. SAMBO - a system for aligning and merging biomedical ontologies [J]. Journal of web semantics, science, services and agents on the world wide web, 2006, 4(3): 196-206.
- [10] 张凌宇, 陈淑鑫, 李敬有. 基于视图的本体集成系统框架的研究 [J]. 计算机仿真, 2014, 31(7): 238-242.
- [11] LAUSEN G, MEIER M, SCHMIDT M. SPARQLing constraints for RDF [C]//Proceedings of the EDBT. New York: ACM, 2008: 499-509.
- [12] HERT M, REIF G, GALL H C. Updating relational data via SPARQL [C]//Proceeding of the 2010 EDBT/ICDT Workshops. New York: ACM, 2010: 1-8.
- [13] 张宗仁, 杨天奇. 基于自然语言理解的 SPARQL 本体查询 [J]. 计算机应用, 2010, 30(12): 3397-3400.
- [14] 汪璟玢, 方知立, 张燕琴. 面向分布式的 SPARQL 查询优化算法 [J]. 计算机科学, 2014, 41(7): 227-231.

Study on Ontology Query Based on WordNet

CHEN Shuxin, ZHANG Lingyu

(Computer Center, Qiqihar University, Qiqihar 161006, China)

Abstract: There are many problems of semantic interoperability between different ontologies, such as semantic confliction and structure heterogeneous. These problems seriously influenced knowledge sharing and reusing between ontologies, and made it difficult to the service of ontology query. In view of this, this paper proposes framework of ontology query based on WordNet, which is called OQ-WordNet. This framework firstly calculates similarities for concepts from different ontologies (i.e., source ontologies) precisely by the lexicon WordNet. Then, OQ-WordNet applies the methods of ontology mapping and integration to generate a new ontology, called target ontology, and to create semantic mappings for these ontologies. Finally, OQ-WordNet achieves the function of ontology query by SPARQL that is a kind of ontology query language.

Key words: ontology; WordNet; ontology query; ontology mapping; ontology integration

基于压缩特征的稀疏表示运动目标跟踪

张红梅, 温荟然, 张向利, 李鹏飞

(桂林电子科技大学 信息与通信学院, 广西 桂林 541004)

摘要: 为了应对目标跟踪中光照、遮挡、以及自身运动等因素的影响, 采用积分图方法提取目标模板的 haar-like 特征, 用满足有限等距条件(RIP)的随机稀疏矩阵对特征投影压缩, 简化目标特征字典的构建; 同时, 在字典中融入背景信息, 利用目标与背景的简单关系提高跟踪的精度; 最后, 利用块正交匹配追踪(BOMP)算法进行成块重构目标, 加快了对稀疏表示的求解, 增强了跟踪的实时性。通过实验发现, 使用基于压缩特征的块正交匹配跟踪算法(CF-BOMP)能构建一个有效的目标外观模型, 增强跟踪的稳定性, 提高跟踪的实时性。

关键词: 特征压缩; 稀疏表示; 粒子滤波; 块正交匹配

中图分类号: TP391

文献标志码: A

doi: 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.005

0 引言

稀疏表示是近年来信号处理领域的热点之一, 为一种对原始信号的分解过程, 该分解过程借助一个事先得到的字典, 将输入信号表示为字典的线性近似。文献[1]首次在人脸识别中运用稀疏表示的方法; 文献[2]则利用线性表示特征构建模板, 结合稀疏表示理论, 成功进行目标识别。随着稀疏表示运用领域的推广, 在 ICCV 2009 上 L1 tracker 算法被首次提出来, 文献[3]提出 L1 tracker 算法是将跟踪问题看成稀疏求解的过程, 结合粒子滤波和稀疏表示思想, 通过构建含有琐碎模板的目标外观模型, 将跟踪问题转化为求解稀疏表示的问题; 文献[4]将压缩感知理论应用到跟踪算法中, 目的在于解决实时性问题; 文献[5]通过设定 L1 正则范数的错误边界, 减少求解稀疏表示待选目标个数, 一定程度上提高了跟踪速度; 文献[6]从重构算法入手对 L1 tracker 进行改进, 采用 APG(Accelerated Proximal Gradient algorithm) 重构算法, 加快了 L1 求解的速度, 提高了跟踪的效率。但以上方法在跟踪的实时性、准确性、稳定性方面仍面临着巨大挑战。

因此, 笔者提出了一种利用压缩特征进行稀

疏表示的目标跟踪方法——CF-BOMP 算法。该算法基于压缩感知理论^[7-8]降维后的特征能够有效表征目标, 简化目标特征模板的构建, 并引入背景信息从而增强跟踪的准确性与稳定性; 同时, 根据结构关系采用了块正交匹配追踪(BOMP)重构算法优化了稀疏表示求解, 实现对目标跟踪准确性与实时性的提升, 通过实验证明了 CF-BOMP 算法在实时性和准确性方面得到提升。

1 字典构建与稀疏求解

1.1 目标的稀疏表示

目标的稀疏表示是对原始信号的分解过程, 该分解过程借助事先得到的目标字典 $D = [s_1, s_2, \dots, s_n]$, 将输入信号表示为字典的线性近似的过程。对于一个待检测的目标 y , 能够通过模板及向量线性组合重构, 即

$$y = \sum_{i=1}^n \alpha_i s_i = D\alpha. \quad (1)$$

式中: $\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n]^T$ 是系数向量。考虑到干扰情况的存在, 目标的重构情况为

$$y = D\alpha + \varepsilon_0 = [D, D_\varepsilon] \begin{bmatrix} \alpha \\ \alpha_\varepsilon \end{bmatrix} = A\omega. \quad (2)$$

式中: $A = [D, D_\varepsilon]$ 含有遮挡字典 D_ε 的目标的过

收稿日期: 2015-10-10; 修订日期: 2016-01-20

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61461010, 61363031); 桂林电子科技大学研究生教育创新计划资助项目(GDYCSZ201413)

作者简介: 张红梅(1970—), 女, 广西桂林人, 桂林电子科技大学教授, 主要从事嵌入式、信息安全及机器视觉等研究, E-mail: hmzh630@gmail.com.

完备基. 利用 A 来线性组合表示目标, 主要目标就是求出系数向量 ω . 由于式(2)是欠定的, 有无穷多个解, 而求解该方程可以通过求解 0 范数来求解稀疏信号, 但 0 范数问题是一个 NP-hard 问题, 很难计算. Donoho 等人提出, 对于某些测量矩阵, 这个问题可以等价于 1 范数求解形式:

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_0 = \operatorname{argmin} \|\alpha\|_1; \\ \text{s. t. } \|y - D\alpha\|_2 < \varepsilon. \end{cases} \quad (3)$$

1.2 压缩特征提取

haar-like 特征是将目标物不同位置的像素灰度特征建模成不同的区域时具有较好的表征能力, 并且能够利用积分图来对 haar-like 特征进行加速计算.

另外, 对于提取每个样本 $z \in \mathbf{R}^{w \times h}$, 为了表明矩形特征海量问题, 用多尺度的矩形滤波器跟 z 做卷积, 得到样本的所有矩形特征, 滤波器集合 $H = \{h_{1,1}, h_{1,2}, \dots, h_{w,h}\}$, 定义如下:

$$h_{w,h}(x,y) = \begin{cases} 1, & 1 \leq x \leq w, 1 \leq y \leq h; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (4)$$

式中: w, h 分别是矩形滤波器的长与宽.

设定 $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_m)^T \in \mathbf{R}^m$ 是样本 z 所有的矩形特征, 其中 $\mathbf{X} = \mathbf{z} \cdot \mathbf{H}$, 每一个矩形滤波器与 z 做卷积都会产生 $(wh)^2$ 个矩阵特征, 而滤波器集 H 的总数为 wh 个, 所以样本 z 的矩形特征数达到 $(wh)^2$, 即 $m = (wh)^2$, m 的范围通常是 $10^6 \sim 10^{10}$, 这个数据是非常庞大. 因此我们引入一个满足有限等距条件 RIP 且非常稀疏的随机矩阵 $\mathbf{R} \in \mathbf{R}^{n \times m}$ ($n \ll m$), 矩阵的元素定义如下:

$$\mathbf{R}(i,j) = \sqrt{p} \times \begin{cases} 1, & \text{概率为 } 1/p; \\ 0, & \text{概率为 } 1 - 1/p. \end{cases} \quad (5)$$

其中, $1/p$ 为稀疏矩阵中不为零元素出现的概率, 本文中设置 $1/p = 4/m$.

将高维度特征空间 \mathbf{X} 投影到低维空间中, 即

$$\mathbf{V} = (v_1, \dots, v_n) = \mathbf{R}\mathbf{X}. \quad (6)$$

式中: $\mathbf{V} = (v_1, \dots, v_n)$ 代表压缩后的特征, 即通过投影矩阵提取的 haar-like 类特征组.

Haar-like 类特征投影如图 1 所示, 采用满足有限等距条件 RIP 的测量矩阵 $\mathbf{R}^{n \times m}$ 提取目标的 haar 类特征, 不仅保留了原始图像的大量信息, 保证了特征的有效性, 而且在目标模版出现部分遮挡时候, 减少了异常像素对于目标将产生的影响, 增强了特征的稳定性.

1.3 含有背景信息的字典构造

笔者在提取目标模板 N_t 的同时, 在其周围位置提取背景 N_b , 利用 1.2 节的特征提取压缩方

法, 得到目标模板与背景模板对应的特征 \mathbf{V}_t 与 \mathbf{V}_b ; 同时, 为了减少光照和遮挡带来的影响, 在目标模板中加入单位矩阵 $\mathbf{I} = (i_1, i_2, \dots, i_n) \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 构成含有背景信息的目标过完备字典 \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = [\mathbf{V}_t, \mathbf{V}_b, \mathbf{I}]. \quad (7)$$

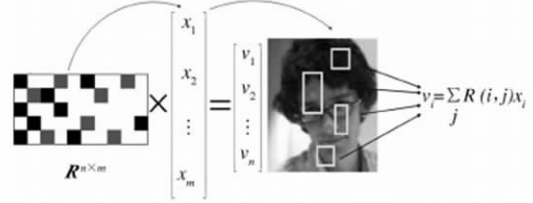


图 1 haar-like 类特征投影

Fig. 1 Haar-like feature projection

1.4 块正交匹配重构

在实际情况中, 稀疏信号出现的非零元素是具有一定的相关性, 在位置上表现出一定的结构性, 表现出成块出现非零元素的情况. 因此, 笔者使用块正交匹配追踪 (BOMP), 利用信号过完备字典的块稀疏结构, 选择残差最配子块进行更新, 提高了重构的速度. 块正交匹配追踪算法的步骤如下.

(1) 初始化步骤. 设定初始化残差 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{y}$, 测量矩阵为 Φ , 初始化块稀疏度为 K .

(2) 感知步骤. 进行第 k 步迭代, 计算残差 \mathbf{r}_{k-1} , 并选择与残差 \mathbf{r}_{k-1} 最匹配的块:

$$\mathbf{i}_k = \arg \max_i \|\Phi^T(i) \mathbf{r}_{k-1}\|_2. \quad (8)$$

(3) 残差更新步骤. 令 $\mathbf{E}_k = \mathbf{E}_{k-1} \cup \mathbf{i}_k$, 然后对残差进行更新:

$$\mathbf{r}_k = (\mathbf{I}_{kp} - \Phi_{\mathbf{E}_k} \Phi_{\mathbf{E}_k}^T) \mathbf{y}. \quad (9)$$

(4) 收敛条件. 判断 k 与 K 的大小关系, 如果 k 小于 K , 返回步骤 2 继续迭代; 否则停止迭代.

2 稀疏表示目标跟踪

2.1 粒子滤波

粒子滤波主要由预测和更新递推得到:

$$p(x_k | z_{1:k-1}) = \int p(x_k | x_{k-1}) p(x_{k-1} | z_{1:k-1}) dx_{k-1}. \quad (10)$$

$$p(x_k | z_{1:k}) = \frac{p(z_k | x_k) p(x_k | z_{1:k-1})}{p(z_k | z_{1:k-1})}. \quad (11)$$

式中: $p(x_k | x_{k-1})$ 为状态转移概率; $p(z_k | x_k)$ 为观测概率. 上面两公式构成最优的贝叶斯估计. 粒子滤波的核心思想就是利用随机样本的加权来表示后验概率密度. 设 k 时刻的粒子为 $\{x_k^i\}_{i=1}^N$, 对应的归一化权重为 $\{w_k^i\}_{i=1}^N$, 则后验概率表示为

$$p(x_k | z_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^N w_k^i \delta(x_k - x_k^i). \quad (12)$$

权重更新方法为

$$w_k^i \propto w_{k-1}^i \frac{p(z_k | x_k^i) p(x_k^i | x_{k-1}^i)}{q(x_k^i | x_{k-1}^i, z_{1:k})}. \quad (13)$$

其中上式分母为采样粒子的建议分布。

2.2 基于稀疏表示的观测

基于稀疏表示的系数向量 α , 笔者用组建的目标压缩特征字典 A 对候选目标的压缩特征进行重构, 根据候选样本的目标观测计算重构残差:

$$\|y - A\alpha\|_2 = \|y - (V_t, V_b, I)(\alpha_t, \alpha_b, \alpha_i)^T\|_2. \quad (14)$$

式中: α_t, α_b 分别为目标模板部分与背景模板部分的稀疏系数向量。如果候选目标为跟踪目标, 那么候选目标对应于目标模板部分的重构误差会很小, 而在背景模板中的重构误差会很大, 反之亦然。因此, 定义基于重构误差比的观测值为

$$r(z) = \frac{\|y - V_t \alpha_t\|}{\|y - V_b \alpha_b\|}. \quad (15)$$

基于重构误差比的观测似然函数为

$$p(z_k | x_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} e^{-\lambda^2(z)^2}}. \quad (16)$$

式中: λ 是控制参数。当目标的重构误差越小的时候, 式(13)所表示的权重就会越大, 也就证明候选样本与目标样本越相似。

2.3 字典模板更新

目标的外观以及背景关系会随着自身运动或者环境的变化而发生改变, 为了保证跟踪的稳定性, 需要对目标及背景模板进行实时更新。针对背景模板在短时间内变化小的情况, 采用间隔 n 帧进行重新采样更新的方法, 设置 $n=5$ 。同时, 采用文献[3]的方法进行目标模板更新, 步骤如下。

(1) 记 v_y 代表跟踪的结果所对应的 haar-like 特征; a 是 v_y 在目标模板特征下的稀疏表示系数; τ 是设定的阈值。

(2) w 是当前目标模板特征组对应的的权重, 即 $w_i = \|v_f^i\|_2^2$ 。其中 v_f^i 为第 i 个位置对应的目标模板特征组。

(3) 根据 v_y 在目标模板特征下的稀疏表示系数对板重 w 进行更新, 即 $w_i = w_i \cdot \exp(a_i)$ 。

(4) 记 $m = \arg \max_{1 \leq i \leq n} a_i, k = \sin(v_y, v_f^m)$, \sin 是相似函数, 本文取余弦函数。如果 $k < \tau$, 则进行替换: 令 $i_0 = \arg \min_{1 \leq i \leq n} w_i, v_f^{i_0} = v_y, w_{i_0} = \text{median}(w)$ 。

当跟踪结果的特征 v_y 与最优目标模板特征的相似度小于给出的阈值, 则用跟踪结果的特征 v_y 代替目标模板特征中权重最小的模板。为了防止偏移, 其权重设为目标模板权重的中值。

2.4 算法流程

笔者提出的 CF-BOMP 算法流程如下:

(1) 前 M 帧时, 快速提取目标模板与背景模板的压缩 haar-like 特征, 添加单位矩阵 I , 构建融入背景信息的目标特征完备字典。

(2) 下一帧时, 在上一帧目标中心附近采样候选目标, 并提取候选目标的压缩 haar-like 特征。

(3) 利用完备字典对候选目标特征进行稀疏表示, 采用 BOMP 重构算法来快速精确重构, 计算重构残差并引入观测似然函数对目标进行最大似然估计, 求出最佳候选目标。

(4) 根据跟踪结果, 计算模板与最新结果相似度, 替换相似度最小模板, 更新目标完备字典。

(5) 返回继续执行第 2 步操作, 实现对目标下一帧的跟踪, 直到视频序列结束。

3 实验结果

实验设置: 候选目标的搜索半径为 $r=15$, 对前 20 帧取样构建初始目标模板, 目标模板个数为 $n_t=20$, 背景目标模板数 $n_b=10$, 采样的候选目标数是 $n=600$, 目标模板更新的阈值设置为 $\tau=40$, 所有实验都是在 CPU 为 i5-3230M、内存 2GB 的计算机上运用 Matlab 2010b 进行仿真。

评价指标: 使用中心坐标误差衡量。若一个视频序列第 i 帧跟踪到的目标物中心坐标为 (x', y') , 而目标物中心的标准坐标是 (x, y) , 定义该帧的跟踪误差为: $\text{Err}(i) = ((x' - x)^2 + (y' - y)^2)^{\frac{1}{2}}$, 中心坐标误差越小, 代表该帧的跟踪精度越高。

为了检验多种干扰情况下的跟踪效果, 实验选用公认测试帧: David indoor、Girl、Coke, 其特性如表 1 所示。选用 CT 算法^[10]、L1-APG 算法^[6] 和 MIL 算法^[11] 进行对比实验, 文献[10]提出的 CT 算法是基于 haar 压缩特征的二分类判别式跟踪方法。而 L1-APG 算法是一种基于 L1 tracker, 采用加速逼近梯度重构算法 (APG) 优化求解速度, 但其含有仿射模型来应对目标尺度变化的问题。MIL 算法将多示例学习方法加入到 Online Boosting 中, 进而利用具有学习能力分类判决器跟踪目标。

稀疏求解的重构算法直接影响了跟踪的效果^[12] (准确度与速度), 为充分验证块正交匹配算法 (BOMP) 能够提高目标跟踪的准确性与实时性, 本文在相同情况下, 对算法的重构精度和运行速度进行比较, 对比了正交匹配追踪算法 (OMP)、增广拉格朗日算法 (ALM)、加速共轭梯

度算法(APG),表2显示了各重构算法在3种视频帧中的平均重构误差,可以看出,BOMP误差最小.

表1 测试视频帧特性

Tab.1 Characteristics of frames

视频序列	主要特性	帧数	格式
David indoor	视角变化,快速运动,光照变化,部分遮挡	770	JPG
Girl	视角变化,快速运动,旋转,遮挡	502	PNG
Coke	快速运动,光照变化,旋转,完全遮挡	291	JPG

表2 平均重构误差

Tab.2 Average reconstruction error

视频帧	重构算法			
	BOMP	OMP	APG	ALM
David indoor	17.3	18.1	21.0	19.4
Girl	21.4	22.0	22.3	21.5
Coke	5.2	5.7	7.0	7.1

表3显示了各重构算法的重构平均帧率,由于BOMP利用重构系数的结构关系,能够成块地对目标进行重构,提高了重构速度.综合表2与表3的结果可以看出,块正交匹配算法(BOMP)在稀疏表示重构中能够提高重构的效率.

表3 平均重构帧率

Tab.3 Average reconstruction speed

视频帧	重构算法			
	BOMP	OMP	APG	ALM
David indoor	11.9	9.7	8.6	4.1
Girl	13.6	12.1	9.8	3.7
Coke	13.1	12.2	10.2	2.5

图2~图4分别显示了4种算法在测试帧David indoor、Girl、Coke中的跟踪情况.综合分析可知,CT算法和MIL算法在跟踪的过程中易受光照变化与目标旋转的干扰,一旦发生偏移,会使目标模板更新并引入错误信息,逐渐远离目标.L1-APG算法虽然能够在目标变小时利用仿射模型准确跟踪目标,但在快速运动与目标旋转的过程中易受到干扰,引起跟踪失败.CF-BOMP算法在整个过程中能够有效跟踪目标,应对光照变化、目标旋转、快速运动、遮挡等干扰.

表4记录了CF-BOMP算法、CT算法和L1-APG算法、MIL算法所对应的3套测试帧的跟踪中心误差数值范围,而该误差能够有效表征跟踪算法的稳定性.通过实验对比发现,CF-BOMP算

法误差浮动范围小,跟踪更加稳定.

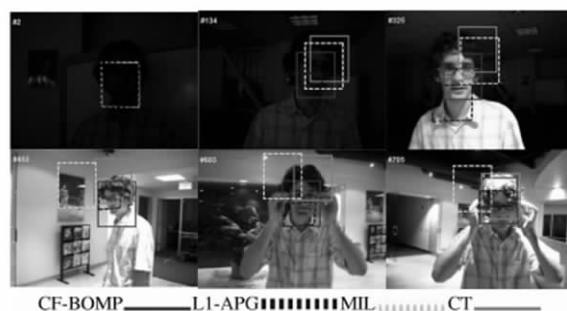


图2 David indoor 跟踪结果

Fig.2 Tracking result for David indoor



图3 Girl 跟踪结果

Fig.3 Tracking result for Girl

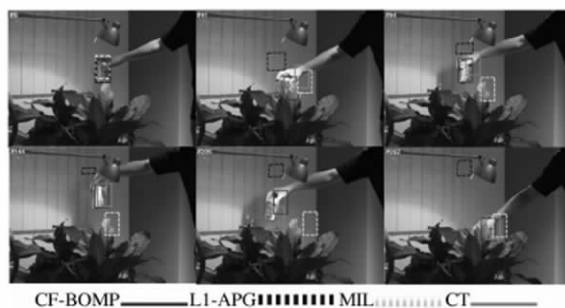


图4 Coke 跟踪结果

Fig.4 Tracking result for Coke

表4 跟踪误差范围

Tab.4 Tracking error

视频帧	CF-BOMP		L1-APG		CT		MIL	
	Min	Max	Min	Max	Min	Max	Min	Max
David indoor	0.5	41.7	1.6	54.69	1.1	85.8	2.2	139.7
Girl	2.1	56.3	2.1	64.9	0.5	111.0	1.5	94.4
Coke	1.0	62.6	1.1	275.9	1.4	81.0	2.2	154.6
平均值	1.2	53.5	1.6	131.8	1.0	92.6	2.0	129.6

表5显示了4种种算法在跟踪过程中的平均中心误差.从表5可以看出,CF-BOMP算法中心误差在3组测试帧中均是最小,说明跟踪精度最高,跟踪更加精确.

图5为4种算法的每帧跟踪中心误差连接成的平滑曲线.从图5可以直观看出,CF-BOMP算法在4种算法中跟踪精度最高,跟踪的稳定性最好.

表5 跟踪中心误差

Tab.5 Tracking error

视频帧	CF-BOMP	L1-APG	CT	MIL
David indoor	12.711 8	24.310 3	42.428 3	52.427 7
Girl	21.246 7	24.905 5	49.673 7	48.852 1
Coke	21.933 4	120.294 0	36.471 0	74.474 2
平均值	18.630 6	56.503 2	42.857 6	58.584 6

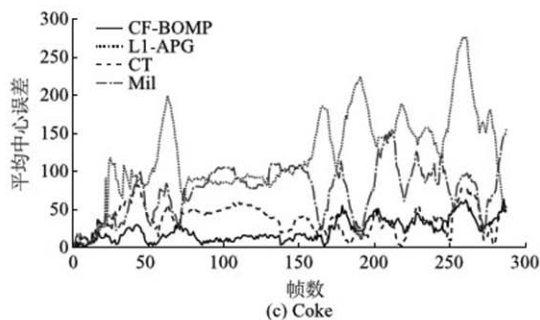
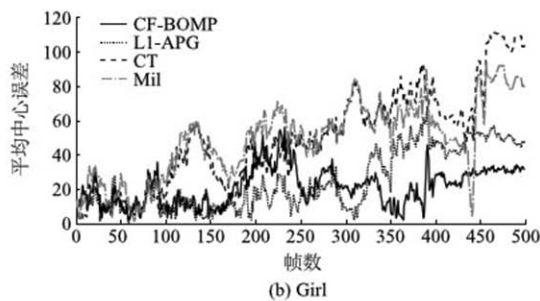
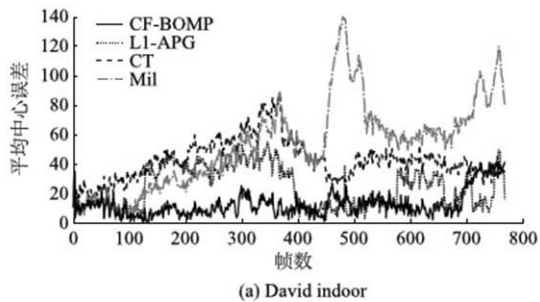


图5 4种算法的中心误差曲线

Fig.5 Tracking error on the videos

表6为4种算法的平均帧率.表6中的CF-BOMP跟踪算法由于构建了简单的外观特征字典,而且使用BOMP算法加速重构计算速度,使得跟踪速度提高到同为稀疏表示跟踪的L1-APG算法速度的2倍左右,是多示例学习的MIL算法速度的3倍左右,但与判决式的CT算法相比,速度还是逊色不少.但是,判决式的跟踪会因为一旦判决失误,目标模板大面积更新后,就不能反映出目

标本身的特性,跟踪结果的偏离会更大.而CF-BOMP算法可以利用过完备字典中的背景信息提高跟踪精度,同时在产生新结果后,能够把重构贡献最小的粒子更新掉,但之前其他粒子模板仍会保留,也就保留了跟踪目标多个时态特征,保证跟踪效果的稳定.

表6 平均帧率

Tab.6 Average frame rate frame

算法	帧率/(F · s ⁻¹)		
	David indoor	Girl	Coke
CF-BOMP	9.352 288 4	10.377 319 3	11.118 399 8
CT	18.030 342 0	16.371 622 0	14.276 280 9
L1-APG	5.404 195 7	5.491 079 7	4.879 613 2
MIL	3.588 970 9	3.814 797 8	3.498 183 2

4 结论

笔者提出了一种基于压缩特征的块正交匹配跟踪算法即CF-BOMP算法.该算法在粒子滤波框架下,运用积分图加速计算跟踪目标haar-like特征,并将特征投影到满足有限等距条件RIP的随机稀疏矩阵上,以实现特征的压缩,达到降维的目的,简化目标特征的过完备字典.同时,在过完备字典中融入背景信息,利用目标与背景存在的简单关系提高跟踪的精确度.最后,在稀疏表示求解过程中,根据实际情况利用块正交匹配追踪(BOMP)提高求解L1-min的速度,引入基于重构误差比的观测模型,实现对目标的快速预测与跟踪,并根据跟踪结果实时更新目标特征模版.通过实验发现,该跟踪方法简化了过完备字典,构建了有效的外观模型,提升了跟踪的实时性,并能够稳定跟踪目标.

参考文献:

- [1] WRIGHT J, YANG A, GANESH A, et al. Robust face recognition via sparse representation [J]. IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence, 2009, 31(2): 2368-2378.
- [2] 张勇,党兰学.线性判别分析特征提取稀疏表示人脸识别方法[J].郑州大学学报(工学版),2015,36(2):94-98.
- [3] MEI Xue, LING Haibin. Robust visual tracking and vehicle classification via sparse representation [J]. IEEE Transactions on software engineering, 2011, 33(11): 2259-2272.
- [4] LI Haixi, SHEN Chunhua, SHI Qinfeng. Real-time

- visual tracking using compressive sensing [C] // 2011 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) . Colorado Springs, CO, USA: IEEE Press, 2011: 1305 – 1312.
- [5] Mei Xue, Ling Haibin, Wu Yi, et al. Minimum error bounded efficient ℓ_1 tracker with occlusion detection [C] // 2011 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) . Washton DC, USA: IEEE Press, 2011: 1257 – 1264.
- [6] BAO Chenglong, WU Yi, LING Haibin, et al. Real time robust ℓ_1 tracker using accelerated proximal gradient approach [C] // 2012 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) . Providence, Rhode Island: IEEE Press, 2012: 1830 – 1837.
- [7] DONOHO D L. Compressed sensing [J]. IEEE Transactions on information theory, 2006, 52(4) : 1289 – 1306.
- [8] CANDES E J, TAO T. Near-optimal signal recovery from random projections: Universal encoding strategies [J]. IEEE Transactions on information theory, 2006, 52(12) : 5406 – 5425.
- [9] ELDAR Y C, KUPPINGER P, BOLCSKEI H. Block-sparsesignals: uncertainty relations and efficient recovery [J]. IEEE Transactions on signal processing, 2010, 58(6) : 3042 – 3054.
- [10] ZHANG Kaihua, ZHANG Lei, YANG Ming-Hsuan. Real-time compressive tracking [C] // Computer Vision-ECCV 2012. Berlin, Heidelberg: Springer, 2012: 864 – 877.
- [11] BABENKO B, YANG, M H, BELONGIE, S. Robust object tracking with online multiple instance learning [J]. IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence, 2011, 33(8) : 1619 – 1632.
- [12] GONZLEZ R C, WOODS R E. 数字图像处理 [M]. 阮秋琦, 阮宇智, 译. 2 版. 北京: 电子工业出版社, 2007.

Sparse Representation Tracking Based on Compressed Features

ZHANG Hongmei, WEN Huiran, ZHANG Xiangli, LI Pengfei

(School of Information and Communication Engineering, Guilin University of Electronic Technology, Guilin 541004, China)

Abstract: In order to deal with the influence of the factors such as light, shade, movement of object and etc. , the integral graph method is used to extract the Haar-like features of the target template , and the features are compressed by a random sparse matrix which meets the limited equidistant conditions(RIP) , then the construction of the target features dictionary is simplified . Meanwhile, the background information is added in the dictionary, and the simple relationship between the target and the background is used to improve the accuracy of tracking. At last, the target can be reconstructed in block by using the block orthogonal matching pursuit (BOMP) reconstruction algorithm, through which can enhances tracking speed. The experimental results show that, the block orthogonal matching pursuit tracking algorithm based on compression feature is powerful in valid target appearance model construction. And it also enhances the tracking stability and improves tracking speed.

Key words: features compression; sparse representation; particle filter; block orthogonal matching

基于质子传导机理的四氮唑分子间氢键研究

李惠萍, 于秀丽, 高鹏杰, 毛桢东

(郑州大学 化工与能源学院, 河南 郑州 450001)

摘要: 为了探明四氮唑体系质子传导速率与分子间氢键强度的关系, 采用密度泛函理论, 在 B3LYP/6-311++G(2d,2p) 水平下对四氮唑二聚体 $N_4CH_2-N_4CH_3$ 进行了几何结构优化和频率分析, 重点分析了能量相对较低的 8 种二聚体的结构、能量、自然键轨道 (NBO) 和电荷转移量, 并采用 QST2 方法在 B3LYP/6-31+G(d) 水平下研究了 8 种二聚体间质子传递的动态过程, 发现了 6 种过渡态, 计算了其传递能垒。结果表明, 四氮唑与质子化的四氮唑阳离子通过 $N\cdots H-N$ 氢键形成分子间相互作用较强的二聚体 $N_4CH_2-N_4CH_3$, $N\cdots H-N$ 氢键表现出明显的红移特征; $N\cdots H-N$ 氢键相互作用稳定化能主要是 N 原子孤对电子轨道与 N-H 键反键轨道之间的相互作用; $N\cdots H-N$ 氢键强度是影响质子传递能垒大小的主要因素, 即直接影响着四氮唑体系中质子的传导速率。

关键词: 四氮唑; $N\cdots H-N$ 氢键; 密度泛函理论; 质子传递

中图分类号: O641 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.006

0 引言

分子间相互作用对物质的性质有很大影响, 在物理、化学、生物等领域发挥着至关重要的作用, 对其本质的研究具有非常重要的意义^[1-2]。氢键是分子间相互作用的主要形式之一, 是一个质子给体与一个受体之间相互作用的关系, 具有较小的键能以及灵活的空间条件, 可以随着分子运动不断地形成与断裂, 这已成为近年来的研究热点^[3]。质子传递发生后, 导致给体和受体的电荷和构型发生变化。如果质子传递沿氢键进行, 或与相邻氢键发生耦合, 则会引起体系极性的改变, 产生电荷的定向传导和分子结构重排。

目前, 质子交换膜燃料电池作为第三代燃料电池是世界各国研究的重点, 用于质子交换膜的氮杂环类化合物具有良好的电化学稳定性和质子传导能力, 在汽车和便携式电子器件方面具有很好的应用前景。有研究表明^[4-6], 该类质子膜在 150~200℃ 及低湿甚至无水条件下, 仍能表现出较高的电导率和稳定性, 其质子以分子间氢键为桥梁进行传递, 传导机理属于结构扩散的 Grotthuss 机理^[7]。其中, 四氮唑体系因其独特的结构特点而含有丰富的氢键网络, 为质子传导提供了

有利条件, 可表现出更强的质子传导能力。笔者选取四氮唑分子与质子化的四氮唑阳离子形成的 $N_4CH_2-N_4CH_3$ 二聚物体系为研究对象, 采用计算化学方法研究其氢键的结构特征和本质, 为该类体系的质子传导机理研究提供理论依据。

1 计算方法

密度泛函理论是一种适用于研究四氮唑体系的省时高效计算方法, 可以用于氢键键能的精确计算。在 B3LYP/6-311++G(2d,2p) 水平下对 $N_4CH_2-N_4CH_3$ 二聚体进行几何结构优化和频率分析, 可以得到分子和二聚物的全优化构型。笔者分析优化得到了 30 种稳定的全优化构型二聚体, 并重点研究了其中 8 种能量相对较低的主要构型如图 1 所示, 其中 a、c、d 为四氮唑阳离子。首先, 计算了二聚体分子间的相互作用能, 并进行了基组重叠误差 (BSSE) 校正和零点振动能 (ZPE) 校正^[8-9]。基组重叠误差校正采用了 Boys 和 Bernardi 提出的均衡校正方法; 其次, 对 8 种二聚体进行了自然键轨道 (NBO) 分析计算, 获得了相互作用稳定化能和分子间净电荷转移量; 最后, 研究了 8 种二聚体间质子传递的动态过程, 得到了 6 种反应过渡态, 并计算获得了反应活化能。文中所有计

收稿日期: 2015-10-04; 修订日期: 2015-12-13

基金项目: 河南省国际交流合作计划项目 (104300510009)

作者简介: 李惠萍 (1958—), 女, 河南洛宁人, 郑州大学教授, 博士, 主要从事新能源材料的开发及应用研究, E-mail: huipingli@zzu.edu.cn.

算均由 Gaussian09 程序^[10]完成,二聚体相互作用能采用下述式(1)~(4)计算。

$$\Delta E = E_{AB} - E_A - E_B \quad (1)$$

$$\Delta E_{ZPE} = E_{ZPEAB} - E_{ZPEA} - E_{ZPEB} \quad (2)$$

$$\Delta E_{CP} = \Delta E + E_{BSSE} \quad (3)$$

$$\Delta E_{CP+ZPE} = \Delta E + \Delta E_{ZPE} + E_{BSSE} \quad (4)$$

式中: ΔE 为二聚体的相互作用能; E_A 为四氮唑分子的单点能; E_B 为四氮唑阳离子的单点能; E_{AB} 为二聚体的单点能; ΔE_{ZPE} 为零点振动校正量; E_{ZPEAB} 、 E_{ZPEA} 、 E_{ZPEB} 分别为四氮唑二聚体、分子、阳离子的零点振动能; ΔE_{CP} 为基组重叠误差校正后的相互作用能; E_{BSSE} 为基组误差校正量; ΔE_{CP+ZPE}

为二聚体经基组重叠误差与零点振动能两项校正后的相互作用能。

2 结果与讨论

2.1 几何结构与氢键相互作用能量

B3LYP/6-311++G(2d,2p) 水平下 8 种四氮唑二聚体 $N_4CH_2-N_4CH_3$ 全优化几何构型的相应部分键长、分子间相互作用能 ΔE 、经 BSSE 和 ZPE 校正后的分子间相互作用能 ΔE_{CP} 和 ΔE_{CP+ZPE} 见表 1。

图 1 中,前 6 种二聚体均为平面构型(A-a-34, B-d-4, B-d-1, B-c-4, A-d-4, A-c-4 和 B-d-4),后 2 种为

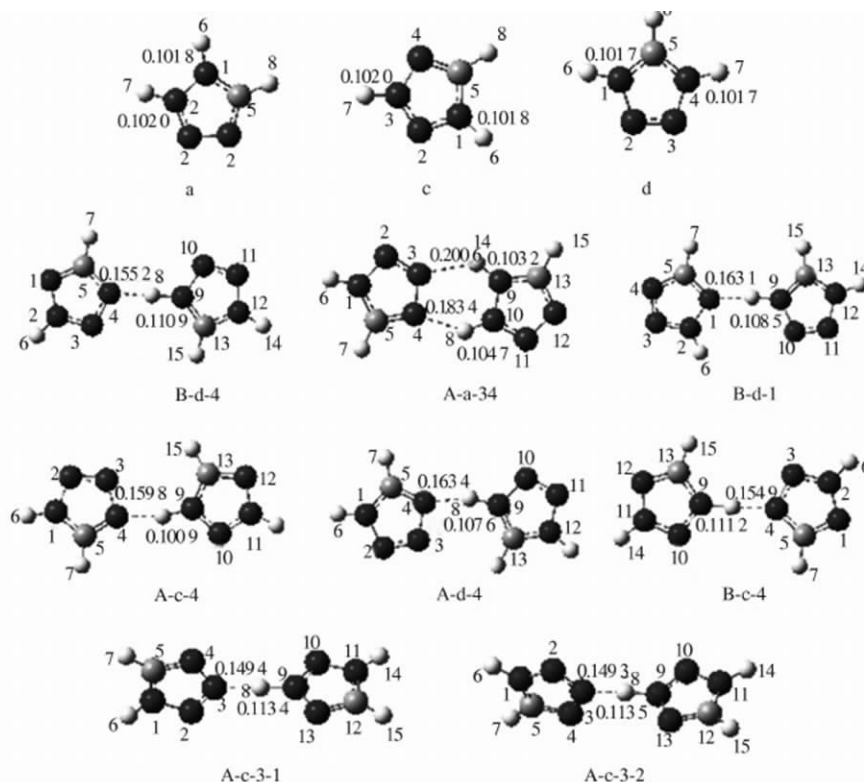


图 1 四氮唑阳离子和 8 种二聚体的全优化几何结构(原子 C: ;原子 N: ;原子 H:)

Fig.1 Optimized geometries of tetrazolium and eight dimers(atom C: ; N: ; H:)

表 1 8 种 $N_4CH_2-N_4CH_3$ 二聚体稳定构型的几何结构参数和相互作用能量

Tab.1 Geometry parameters and interaction energy of eight $N_4CH_2-N_4CH_3$ stable dimers

二聚体	$R_{(N-H)} /$ nm	$R'_{(N-H)} /$ nm	$R_{(N \cdots H-N)} /$ nm	$\Delta R_{(N-H)} /$ nm	$\Delta E /$ ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)	$\Delta E_{CP} /$ ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)	$\Delta E_{CP+ZPE} /$ ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)
A-a-34	0.103 2	0.101 8	0.280 1	0.001 4	-141.58	-139.45	-134.58
	0.104 7	0.102 0	0.273 4	0.002 7	-141.58	-139.45	-134.58
B-d-4	0.110 9	0.101 7	0.266 1	0.009 2	-104.84	-102.63	-102.43
B-d-1	0.108 5	0.101 7	0.271 2	0.006 8	-61.63	-59.67	-59.54
A-c-4	0.108 9	0.102 0	0.266 4	0.006 9	-117.46	-115.40	-113.89
A-d-4	0.107 6	0.101 7	0.267 9	0.005 9	-115.87	-113.85	-111.36
B-c-4	0.111 2	0.101 7	0.266 0	0.009 5	-105.93	-103.77	-103.90
A-c-3-1	0.113 4	0.102 0	0.262 7	0.011 4	-120.18	-117.77	-118.85
A-c-3-2	0.113 5	0.102 0	0.262 7	0.011 5	-120.18	-117.76	-118.90

交叉构型(A-c-3-1和A-c-3-2),二面角约为 86° . 优化所得分子的几何结构参数与文献[11]所列实验数据吻合较好,键长误差大小范围为 $-0.01 \sim 0.03$ nm;所有二聚体中的氢键均为 $N \cdots H-N$,而非 $N \cdots H-C$.

由表1可知,与四氮唑阳离子(a、c、d)相应的 $N-H$ 键长 $R'_{(N-H)}$ 相比,二聚体中的 $N-H$ 键长 $R_{(N-H)}$ 均有所增大,增幅为 $0.0014 \sim 0.0115$ nm,为红移特征^[12]. 其中,二聚体A-c-3-2的 $N-H$ 键长变化最大, $\Delta R_{(N-H)}$ 为 0.0115 nm;二聚体A-a-34的 $\Delta R_{(N-H)}$ 最小,为 0.0014 nm. 经基组重叠误差(BSSE)和零点振动能(ZPE)校正后,8种二聚体分子间相互作用能大小在 $-59.54 \sim -134.58$ $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,属于强相互作用. 其大小顺序为:A-a-34 > A-c-3-2 > A-c-3-1 > A-c-4 > A-d-4 > B-c-4 > B-d-4 > B-d-1,该顺序与 $\Delta R_{(N-H)}$ 和 $R_{(N \cdots H-N)}$ 大小顺序并不一致. 其中,A-a-34的 $\Delta E_{\text{CP}+ZPE}$ 最大,但其 $\Delta R_{(N-H)}$ 最小,两个氢键键长

$R_{(N \cdots H-N)}$ 最长,原因是A-a-34同时存在两个氢键,使其相互作用能相对较大;A-c-4和A-d-4的 $\Delta R_{(N-H)}$ 明显小于B-c-4,但前两者的相互作用能却大于B-c-4,其原因可能是前者C(13)—H(15)键与相邻分子N(3)原子之间存在相互作用.

2.2 自然键轨道分析

为探讨四氮唑分子间氢键相互作用的本质,还对 $N_4\text{CH}_2-N_4\text{CH}_3$ 体系在B3LYP/6-311++G(2d,2p)水平下进行了自然键轨道分析(NBO),表2列出了8种 $N_4\text{CH}_2-N_4\text{CH}_3$ 二聚体的自然键轨道分析的部分结果及其分子间的净电荷转移量 ΔQ . 对于 $N_x \cdots H-N$ 氢键体系,其相互作用的本质是 N_x 的孤对电子轨道和 $N-H$ 的反键轨道之间的相互作用^[13]. 稳定化能 E_s 的大小反映了电子供体(Donor)轨道i与电子受体(Acceptor)轨道j之间相互作用的强弱. 稳定化能 E_s 越大,表示两轨道之间的相互作用越强,轨道i向轨道j提供电子的倾向越大.

表2 8种 $N_4\text{CH}_2-N_4\text{CH}_3$ 二聚体的NBO分析结果及净电荷转移量

Tab.2 Results from NBO analysis and net charge transfer of eight $N_4\text{CH}_2-N_4\text{CH}_3$ dimers

二聚体	供电子轨道	受电子轨道	$E_s / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	$\Delta Q/e$
A-a-34	LP (1) N3	BD* (1) H14—N9	85.83	0.090 8
	LP (1) N4	BD* (1) H8—N10	42.04	
B-d-4	LP (1) N4	BD* (1) H8—N9	260.85	0.143 7
B-d-1	LP (1) N1	BD* (1) H8—N9	203.61	0.116 3
A-c-4	LP (1) N1	BD* (1) H8—N9	209.60	0.121 1
A-d-4	LP (1) N4	BD* (1) H8—N9	179.66	0.107 6
B-c-4	LP (1) N4	BD* (1) H8—N9	264.66	0.145 8
A-c-3-1	LP (1) N3	BD* (1) H8—N9	319.38	0.169 8
A-c-3-2	LP (1) N3	BD* (1) H8—N9	320.43	0.170 3

由表2可知, $N_4\text{CH}_2-N_4\text{CH}_3$ 二聚体中分子间的相互作用主要存在于四氮唑分子中N原子的孤对电子轨道 $n(N)$ 和四氮唑阳离子中 $N-H$ 反键轨道 $\sigma^*(N-H)$ 之间. A-c-3-2与A-c-3-1构型存在微小差别,其 $n(N)$ 与 $\sigma^*(N-H)$ 间的相互作用稳定化能也非常接近,分别为 320.43 $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、 319.38 $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,在8种构型中最大,即其氢键作用最强. A-a-34构型两氢键的稳定化能最小,分别为 42.04 $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 和 85.83 $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,即氢键作用最弱. 8种构型的分子间氢键相互作用稳定化能的大小顺序为:A-c-3-2 > A-c-3-1 > B-c-4 > B-d-4 > A-c-4 > B-d-1 > A-d-4 > A-a-34. 这与表1中 $N-H$ 键长伸长量 $\Delta R_{(N-H)}$ 的大小顺序一致,符合传统的 $X \cdots H-Y$ 氢键红移特征,相互作用稳定化能越大,H—Y键伸长更明显. 由

电荷转移量计算结果可知,二聚体中的电子由电子供体(四氮唑分子)向电子受体(质子化的四氮唑离子)传递,其净电荷转移量 ΔQ 见表2. 其大小顺序与稳定化能的大小顺序一致,即电荷转移量越大,相互作用稳定化能越大,氢键强度越大.

2.3 四氮唑体系中质子的传导

氮杂环类化合物作为质子载体接枝疏水性主链共聚成膜,质子载体被固定,因而质子传递可排除运载型机理,只能是结构扩散. 杂环化合物分子间氢键网络重组而引起质子在分子间传递,影响该类质子膜电导率的因素有分子间氢键的强度、聚合物主链的活性及杂环体的含量等^[14-15].

为了探明四氮唑体系质子传导率与氢键强度的关系,在B3LYP/6-31+G(d)水平下对8种二

聚体间的质子传递过程进行了分析研究,反应活化能大小的主要影响因素为分子间氢键强度和两分子间转动的相对大小^[16],各活化能 E_a 大小见表 3.

表 3 8 种 $N_4CH_2-N_4CH_3$ 二聚体在质子传递反应中的活化能

Tab.3 Active energy of proton transition reactions for eight $N_4CH_2-N_4CH_3$ dimers

二聚体	$E_a/(kJ \cdot mol^{-1})$	二聚体	$E_a/(kJ \cdot mol^{-1})$
B-d-4	3.96	A-d-4	9.02
A-a-3-4	12.66	B-c-4	4.45
B-d-1	1.66	A-c-3-1	3.53
A-c-4	5.16	A-c-3-2	3.53

A-c-3-1 和 A-c-3-2 发生的是质子自传递反应,即反应前后二聚体构型相同.由表 3 可知,两者活化能相同且最小,仅为 $3.53 kJ \cdot mol^{-1}$,其原因是 A-c-3-1 和 A-c-3-2 的 $N \cdots H-N$ 氢键强度最大,且为直线型,质子传递过程中两分子之间没有相对转动,反应所需的活化能较低. B-c-4 和 A-d-4 的质子传递也属于自传递反应,活化能分别为 $4.45 kJ \cdot mol^{-1}$ 和 $9.02 kJ \cdot mol^{-1}$,其中 B-c-4 氢键强度稍弱于 A-c-3-1 和 A-c-3-2,且质子传递过程中分子间发生了较小的相对转动,但 B-c-4 的活化能并没有明显增大,而 A-d-4 较大的分子间相对转动和较小的氢键强度使其反应活化能明显增大. A-a-3-4 与 B-d-1 之间可以相互转化,两者氢键强度较小,反应中 A-a-3-4 两杂环间存在较大的相对转动,且需要打破其中一个氢键,因而其活化能最大. B-d-4 和 A-c-4 之间也可以相互转化, B-d-4 同样因相对较大的分子间氢键强度和较小的分子间相对转动量而具有更小的活化能 $3.96 kJ \cdot mol^{-1}$,而 A-c-4 的活化能则为 $5.16 kJ \cdot mol^{-1}$,较前者稍大.由以上分析可知,氢键作用较强的二聚体构型在质子传递反应中,分子间的相对转动量也往往较小,从而使反应所需要的活化能较低,这表明二聚体的氢键强度与其质子传递的难易程度直接相关,分子间氢键的强度是四氮唑体系质子传导快慢的主要影响因素,即强度越大,越有利于质子的传递.

3 结论

(1) $N_4CH_2-N_4CH_3$ 二聚体中存在强相互作用的分子间 $N \cdots H-N$ 氢键,经基组重叠误差校正和零点能校正后的相互作用能大小在 $-59.54 \sim -134.58 kJ \cdot mol^{-1}$.

(2) 分子间 $N \cdots H-N$ 氢键表现出明显的红移特征, $N-H$ 键伸长量 $\Delta R_{(N-H)}$ 、轨道间相互作用的稳定化能、分子间净电荷转移量均随氢键强度的增大而增大.

(3) 氢键强度是四氮唑体系质子传导快慢的主要影响因素,即强度越大,质子传递速率越快.

参考文献:

- [1] 吴阳,冯璐,张向东. $C_6H_5-H \cdots X$ 分子间的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008, 24(4): 653-658.
- [2] 徐丽娜,肖鹤鸣,方国勇,等. NTO 二聚体分子间相互作用的理论研究[J]. 化学学报, 2005, 63(12): 1062-1068.
- [3] 王庆文. 有机化学中的氢键问题[M]. 天津: 天津大学出版社, 1993: 200-201.
- [4] SONG M K, LI Huiping, LIU Meilin, et al. Tetrazole based, anhydrous proton exchange membranes for fuel cells[J]. Advanced materials, 2014, 26(8): 1277-1282.
- [5] BOROGLU M S, CELIK S U. Synthesis and proton conductivity studies of 5-aminotetrazole doped sulfonated polymer electrolyte membranes[J]. Polymer composites, 2011, 32(10): 1625-1632.
- [6] SINIRLIOGLU D, CELIK S U, MUFTUOGLU A E. Novel composite polymer electrolyte membranes based on poly(vinyl phosphonic acid) and poly(5-(methacrylamido) tetrazole)[J]. Polymer engineering and science, 2015, 55(2): 260-290.
- [7] ZHOU Zhen, LIU Rui, et al. Intra- and intermolecular proton transfer in 1H(2H)-1,2,3-triazole based systems[J]. Journal of physical chemistry A, 2006, 110(7): 2322-2324.
- [8] 李权. 三氮杂苯-水氢键复合物的结构与性质[J]. 中国科学: B 辑化学, 2005, 35(5): 18-21.
- [9] BOYS S F, BERNARDI F. The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies some procedures with reduced errors[J]. Molecular physics 1970, 19(4): 553-556.
- [10] FRISCH M J, TRUCKS G W, SCHLEGELH B, et al. Gaussian 09 [CP]. Revision A01. Wallingford CT: Gaussian Inc, 2009.
- [11] ZHU Weihua, XIAO Heming. First-principles study of electronic structure, absorption spectra, and thermodynamic properties of crystalline 1H-tetrazole and its substituted derivatives[J]. Structural chemistry, 2010, 21(4): 847-854.
- [12] 陈自然,何展荣,张宇红. $C_6H_5O-H \cdots X$ 分子间氢键的理论研究[J]. 四川师范大学学报(自然科学

- 版), 2013, 36(3): 435–439.
- [13] 肖祎, 方意, 刘玉震, 等. 核酸中碱基的氢键作用机理及电子特征理论研究 [J]. 化学研究, 2014, 25(2): 187–194.
- [14] TRUJILLO C, SANCHEZ S G. Computational study of proton transfer in tautomers of 3-and 5-hydroxypyrazole assisted by water [J]. Journal of chemical physics and physical chemistry, 2015, 16(10): 2140–2150.
- [15] OZDEMIR N. Quantum chemical investigation of the intra- and intermolecular proton transfer reactions and hydrogen bonding interactions in 4-amino-5-(2-hydroxyphenyl)-2H-1,2,4-triazole-3(4H)-thione [J]. Journal of molecular modeling, 2013, 19, (1): 397–406.
- [16] LI Ailin, YAN Tianying, SHEN Panwen. Exploring proton transfer in 1,2,3-triazole-triazolium dimer with ab initio method [J]. Journal of power sources, 2011, 196(3): 905–910.

Study on the Intermolecular Hydrogen Bonds of Tetrazole Based on Proton Conduction Mechanism

LI Huiping, YU Xiuli, GAO Pengjie, MAO Zhendong

(School of Chemical Engineering and Energy, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: The geometric optimization and harmonic vibrational frequency for tetrazole dimers were carried out by DFT at B3LYP/6-311++G(2d,2p) level, in order to explore the relationship between the proton conducting and intermolecular hydrogen bond strength of tetrazole system. The structures, energy, natural bond orbitals and charge transfer of eight main $N_4CH_2-N_4CH_3$ dimers were investigated. And then, the QST2 method was employed in studying the dynamic process of proton transfer among the eight dimers at B3LYP/6-31+G(d) level. There were six transition states in the proton transfer processes among eight tetrazole dimers, and their energy barriers were also calculated. The results showed that the $N\cdots H-N$ hydrogen bonds of tetrazole dimers were the bridges which connected tetrazole and tetrazolium, and these hydrogen bonds showed strong intermolecular interactions and obvious red-shift characteristics. The interaction between the lone-electron pair orbital of atom N and the anti-bonding orbital of $N-H$ was the main source of the stabilization energy. The strength of hydrogen bond was one of main factors affecting the proton transfer reaction's energy barrier, which may directly affect the proton transfer rate of tetrazole system.

Key words: tetrazole; $N\cdots H-N$ hydrogen bond; DFT; proton transfer

文章编号: 1671-6833(2016)03-0032-04

SAPO-56 分子筛的晶化区研究

詹予忠, 董贺新, 董佳佳, 宋孟璐, 韩 丽

(郑州大学 化工与能源学院, 河南 郑州 450001)

摘 要: 以 N,N',N',N'-四甲基-1,6-己二胺(TMHD) 为模板剂、拟薄水铝石为铝源、白炭黑为硅源、磷酸为磷源, 采用静态水热法合成 SAPO-56 分子筛. 产物晶相和结晶度采用 XRD 确定, 考察原料配比对分子筛合成的影响, 获得了合成 SAPO-56 分子筛的晶化区. 结果表明, 可合成 SAPO-56 分子筛的摩尔比范围大致为: $0.16 < n(\text{SiO}_2/\text{M}) < 0.31$, $0.35 < n(\text{Al}_2\text{O}_3/\text{M}) < 0.56$, $0.26 < n(\text{P}_2\text{O}_5/\text{M}) < 0.45$, 其中 $\text{M} = \text{SiO}_2 + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{P}_2\text{O}_5$; 调节水量和模板剂的量还可以扩展 SAPO-56 分子筛的晶化区.

关键词: 磷酸铝硅分子筛; 水热合成; 晶化区; 模板剂

中图分类号: TQ426.95 **文献标志码:** A doi: 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.007

0 引言

沸石分子筛是具有规则孔道结构和巨大比表面积的多孔晶体材料, 在催化、吸附分离和离子交换等领域有广泛应用. 人造沸石一般采用水热法合成, 合成条件如原料及配比、模板剂(结构导向剂)、添加剂、晶化温度和时间等强烈影响特定沸石相的生成. 即使同一种沸石, 合成条件不同, 产物的元素含量、精细结构、晶体缺陷、晶体形貌和晶体大小也不同, 这将强烈影响沸石的性能特别是催化性能. 因此, 研究沸石的合成影响因素, 获得合成特定沸石的晶化区, 从而可以在晶化区内调变沸石性能, 是沸石进一步应用研究的基础.

SAPO-56 分子筛是 Wilson 等^[1] 1994 年首次报道的一种磷酸铝硅分子筛, 其拓扑结构以 AFX 命名. 这种分子筛的三维孔道结构由双六元环、gme 笼和 aft 笼构成, 其八元环孔口尺寸为 $0.34 \text{ nm} \times 0.36 \text{ nm}$ ^[2-3], 属于具有大空穴结构的小孔沸石. SAPO-56 分子筛在催化和吸附分离等领域有较好的应用前景, 但其合成研究很少. 2001 年田鹏等^[4] 考察了原料添加量对 SAPO-56 分子筛合成的影响, 获得了合成的晶化区间. 2003 年杨一青等^[5] 考察了 SAPO-56 分子筛的晶化历程. 2013 年 Xie 等^[6] 采用微波辅助合成出了小晶粒的 SAPO-56, 并大大缩短了合成时间. 需要指出的

是, 这些合成研究均采用较昂贵的硅溶胶做硅源. 2014 年作者课题组采用较廉价的白炭黑为硅源, 初步考察了合成硅铝比、正丙胺部分替代模板剂、添加晶种对 SAPO-56 分子筛形貌和粒径的影响^[7]. 本文的目的, 是研究以白炭黑为硅源时合成条件对生成 SAPO-56 分子筛的影响. 在首先固定水、模板剂和磷用量的情况下, 通过系统改变硅、铝的添加量, 研究硅、铝量对合成的影响, 并进一步确定 SAPO-56 分子筛的晶化区间. 在此基础上, 选择典型实验点, 研究水量、模板剂量对合成的影响.

1 实验部分

1.1 原料与试剂

磷酸(分析纯, 洛阳市化学试剂厂); 拟薄水铝石(工业级, 山西铝厂); 白炭黑(工业级, 苏州市东化钒硅有限公司); N,N',N',N'-四甲基-1,6-己二胺(TMHD)(工业级, 玛雅高纯度化学品); 去离子水(自制).

1.2 分子筛的合成方法

采用静态水热法合成 SAPO-56 分子筛. 按特定原料组成配比, 首先向磷酸中加入去离子水, 在搅拌下缓慢加入拟薄水铝石和白炭黑, 然后缓慢加入模板剂 TMHD, 待充分混合后, 将凝胶转移至 100 ml 带有聚四氟乙烯内衬的不锈钢反应釜内,

收稿日期: 2015-10-11; 修订日期: 2015-12-18

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(U1204215); 中国石油天然气股份有限公司项目(12-08-05-05)

作者简介: 詹予忠(1965—), 男, 河南罗山人, 郑州大学教授, 博士, 主要从事应用表面与胶体化学研究, E-mail: zhanyz@zzu.edu.cn.

置于烘箱中静态水热晶化. 晶化条件固定为 200 °C、72 h. 将产品抽滤并用去离子水洗涤至滤液接近中性, 100 °C 干燥, 550 °C 焙烧 6 h 除去模板剂.

1.3 分子筛的表征

晶体结构测定采用德国 BRUKER-AXS 有限公司的 D8 ADVANCE 型 X 射线衍射仪, 使用石墨单色器, Cu K α 射线, 管电压 30 kV, 管电流 20 mA, 扫描速度 5°/min, 扫描范围 5°~40°. 产物晶相组成采用 Jade 软件和相关文献 [8] 确定, XRD 图中未标注的峰为 SAPO-56 的衍射峰, 杂晶峰均有标注.

2 结果与讨论

2.1 硅添加量对合成 SAPO-56 分子筛的影响

首先摩尔比按 2 (TMHD) : x (SiO₂) : 1 (Al₂O₃) : 1 (P₂O₅) : 40 (H₂O), 研究单独变化硅量对合成的影响, 硅量 x 变化范围为 0.3~1.0, 产物的 XRD 结果见图 1. 由图 1 可知, 当 x 在 0.4~0.9 时基本可以获得纯净的高结晶度 SAPO-56 分子筛 (x 为 0.5 时有微弱 SAPO-20 杂晶), 过高或过低硅量则产物有明显的 SAPO-20 杂晶, 相应 SAPO-56 的结晶度降低很多. 文献 [2] 报道, 硅用量低时将生成 SAPO-17 或 AIPO-17 杂晶, 而我们的研究结果是硅用量低时将产生 SAPO-20 杂晶. SAPO-20 是具有 SOD 结构的分子筛^[3], 孔径很小不能容纳 TMHD 模板剂, 一般不加模板剂即可生成.

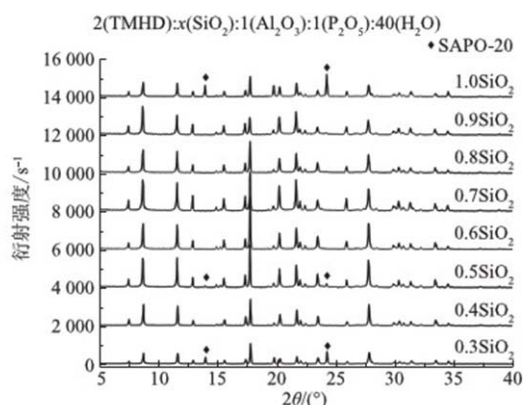


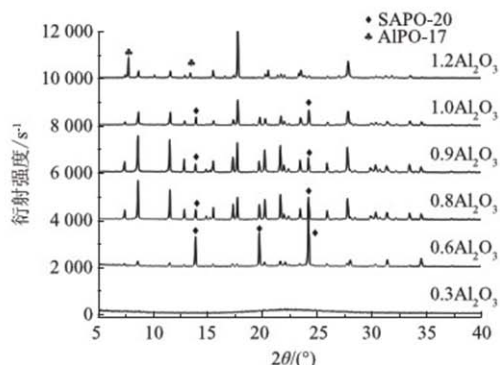
图 1 不同硅添加量合成样品的 XRD 图

Fig. 1 XRD Patterns of Products Synthesized with Different Si Contents

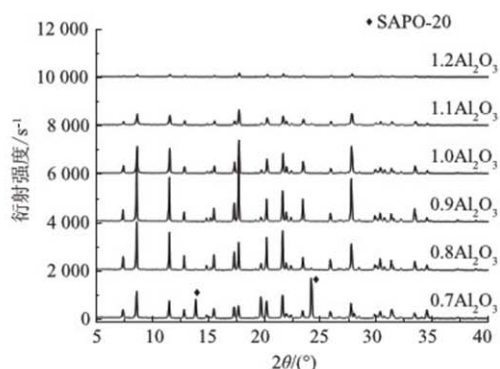
2.2 铝添加量对合成 SAPO-56 分子筛的影响

摩尔比按 2 (TMHD) : x (SiO₂) : y (Al₂O₃) : 1 (P₂O₅) : 40 (H₂O), 选择 3 个典型的硅用量 (x 分别为 0.3、0.4 和 1.0), 研究单独变化铝量对合

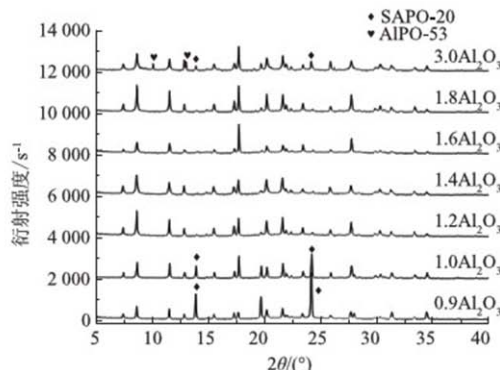
成的影响, 产物 XRD 见图 2. 当硅用量为 0.3 时, 各铝用量下均不能合成纯净的 SAPO-56 分子筛 (图 2(a)). 铝量为 0.3 时产物为无定形, 铝量为 0.6 时产物是 SAPO-20 分子筛, 仅有极微弱的 SAPO-56 峰. 铝量为 0.8、0.9 和 1.0 时产物含明显的 SAPO-20 杂晶, 且 SAPO-56 的衍射峰逐渐下降. 当铝量为 1.2 时, 产物主要是 AIPO-17 分子筛, 仅含少量 SAPO-56, 这进一步说明低硅用量不利于 SAPO-56 分子筛的生成.



(a) 2(TMHD):0.3(SiO₂): x (Al₂O₃):1(P₂O₅):40(H₂O)



(b) 2(TMHD):0.4(SiO₂): x (Al₂O₃):1(P₂O₅):40(H₂O)



(c) 2(TMHD):1.0(SiO₂): x (Al₂O₃):1(P₂O₅):40(H₂O)

图 2 不同铝添加量合成样品的 XRD 图

Fig. 2 XRD Patterns of Products Synthesized with Different Al Contents

当将硅用量提高至 0.4、铝为 0.7 时产物仍

含有明显的 SAPO-20 杂晶; 但铝用量为 0.8、0.9 和 1.0 时产物是纯净的高结晶度 SAPO-56 分子筛; 提高铝量至 1.1, 产物结晶度明显下降但没有杂晶; 进一步提高铝量至 1.2, 产物接近无定形, 仅有微弱的 SAPO-56 衍射峰, 但没有杂晶峰。

当硅用量提高至 1.0 时, 适中的铝添加量下 (铝摩尔含量为 1.2 ~ 1.8) 仍能合成纯净的 SAPO-56 分子筛。但铝用量更低时, 产物含有明显的 SAPO-20 杂晶。铝用量更高时, 产物含明显的 SAPO-20 和 AlPO-53 分子筛杂晶。

2.3 SAPO-56 分子筛的晶化区

摩尔比按 2 (TMHD) : x (SiO_2) : y (Al_2O_3) : 1 (P_2O_5) : 40 (H_2O), 即固定模板剂量、磷量和水用量, 在固定晶化温度和晶化时间下, 通过系统改变硅、铝的添加量, 在三元相图上可以确定合成 SAPO-56 分子筛的结晶区, 结果如图 3 所示, 图中直线 A、B、C、D 上的实验点分别对应于图 1 和图 2。可合成 SAPO-56 分子筛的摩尔比范围大致为: $0.16 < n(\text{SiO}_2/\text{M}) < 0.31$, $0.35 < n(\text{Al}_2\text{O}_3/\text{M}) < 0.56$, $0.26 < n(\text{P}_2\text{O}_5/\text{M}) < 0.45$, 其中 $\text{M} = \text{SiO}_2 + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{P}_2\text{O}_5$ 。该相图直观显示了可稳定合成 SAPO-56 分子筛的原料配比, 在 SAPO-56 结晶区内调节配比可以调节合成产品的性能, 以适应不同的应用。另外, 一些实验点产物仅含极微量杂晶, 有些实验点产物结晶度较差, 预计通过适当改变晶化温度、时间等, 在这些点也可得到纯净的高结晶度 SAPO-56 分子筛。

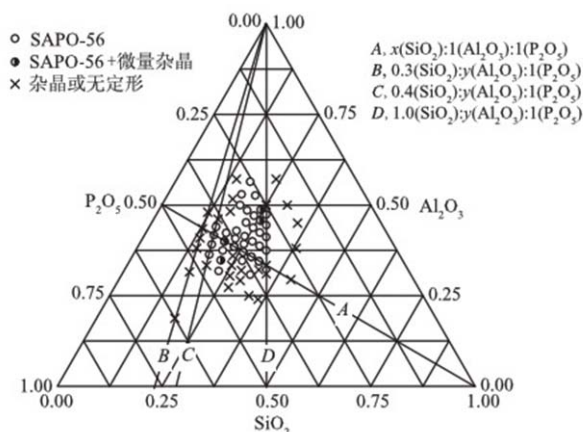


图3 SAPO-56 分子筛水热合成的 Si-Al-P 三元体系相图

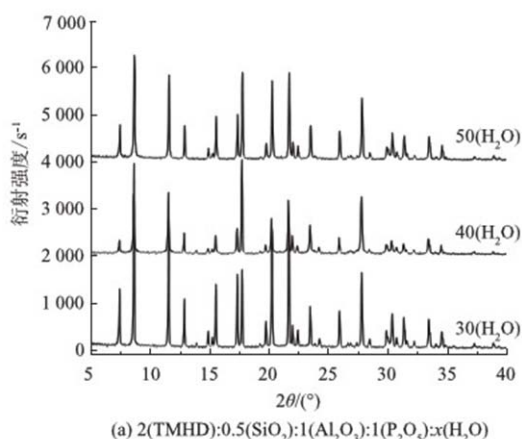
Fig. 3 Ternary phase diagram of SAPO-56

2.4 水量对合成 SAPO-56 分子筛的影响

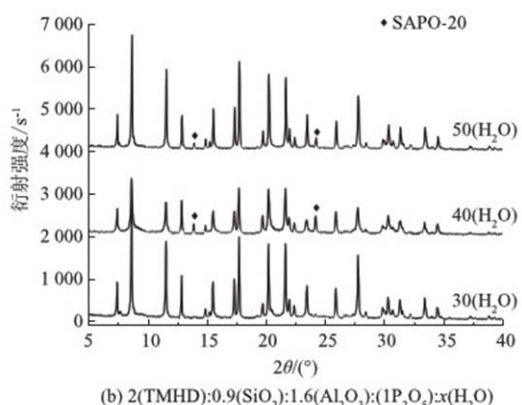
水对分子筛的合成起着非常重要的作用, 因此研究水量对合成的影响也是很有必要的。在前述合成相区的基础上, 选择两个实验点研究增加和减少水量对合成的影响。

当摩尔配比按 2 (TMHD) : 0.5 (SiO_2) : 1 (Al_2O_3) : 1 (P_2O_5) : x (H_2O) 合成时, 水量 x 为 40 可以合成纯净的 SAPO-56 分子筛, 减少水量到 30 或增加水量到 50 仍能合成纯净的 SAPO-56 分子筛, 而且结晶度均有所提高 (图 4 (a))。当摩尔配比按 2 (TMHD) : 0.9 (SiO_2) : 1.6 (Al_2O_3) : 1 (P_2O_5) :

x (H_2O) 合成时, 水量为 40 和 50 均不能生成纯净的 SAPO-56 分子筛, 产物含有少量 SAPO-20 杂晶。但当水量降低至 30 时, 产物为纯净的高结晶度 SAPO-56 分子筛 (图 4 (b)), 这表明调节水量也可扩大 SAPO-56 分子筛的晶化范围。



(a) 2(TMHD):0.5(SiO_2):1(Al_2O_3):1(P_2O_5): x (H_2O)



(b) 2(TMHD):0.9(SiO_2):1.6(Al_2O_3):1(P_2O_5): x (H_2O)

图4 不同水量合成样品的 XRD 图

Fig. 4 XRD Patterns of Products Synthesized with Different H_2O Contents

2.5 模板剂量对合成 SAPO-56 分子筛的影响

模板剂对一些分子筛的合成是必不可少的。由于模板剂多采用价格较昂贵的有机胺, 而且后期还需焙烧除去, 成本高又污染环境, 因此降低模板剂的用量有实际意义。对于 SAPO-56 分子筛的合成, 目前报道的模板剂只有 TMHD 一种。这里配比按 x (TMHD) : 0.6 (SiO_2) : 1.2 (Al_2O_3) : 1 (P_2O_5) : 40 (H_2O), 研究模板剂量对合成 SAPO-56 分子筛的影响, 其中 x 取 0.5、1.0、1.4、1.8、2.0, 产物 XRD 见图 5。由图可知, 当采用通常模板剂量为 2 时, 在此配比下产物并非纯净的 SAPO-56 分子筛, 而是含有明显的三水铝石 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 。当降低模板剂量为 1.8 和 1.4 时, 产物为纯净的 SAPO-56 分子筛, 这表明不仅可以大幅度降低模板剂用量, 而且可以通过调节模板剂量扩大 SAPO-56 分子筛的晶化范围。当模板剂量降至 1.0 时, 产物含有明显的 SAPO-17 杂晶; 进一

步降低模板剂量至 0.5,产物则几乎为纯的 SAPO-11 分子筛. 文献 [2] 也已指出低 TMHD 用量将导致生成 SAPO-11 分子筛.

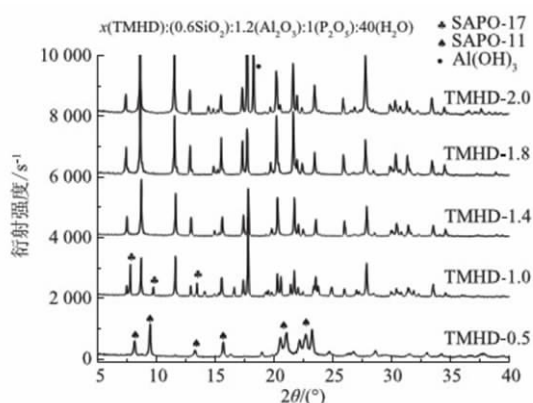


图5 不同模板剂量合成样品的 XRD 图

Fig.5 XRD Patterns of Products Synthesized with Different Template Contents

3 结论

通过系统研究硅、铝对合成的影响,获得合成 SAPO-56 分子筛的晶化相区,可合成 SAPO-56 分子筛的摩尔比范围大致为: $0.16 < n(\text{SiO}_2/\text{M}) < 0.31$, $0.35 < n(\text{Al}_2\text{O}_3/\text{M}) < 0.56$, $0.26 < n(\text{P}_2\text{O}_5/\text{M}) < 0.45$, 其中 $\text{M} = \text{SiO}_2 + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{P}_2\text{O}_5$, 且调节水量和模板剂量可以扩展 SAPO-56 分子筛的晶化区.

M) < 0.45 , 其中 $\text{M} = \text{SiO}_2 + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{P}_2\text{O}_5$, 且调节水量和模板剂量可以扩展 SAPO-56 分子筛的晶化区.

参考文献:

- [1] WILSON S T. Crystalline silicoalumino phosphates SAPO-36 and SAPO-56: US5370851 [P]. 1994-04-25.
- [2] WILSON S T, BROACH R W, BLACKWELL C S, et al. Synthesis, characterization and structure of SAPO-56, a member of the ABC double-six-ring family of materials with stacking sequence AABCCBB [J]. Microporous mesoporous mater, 1999, 28: 125-137.
- [3] BAERLOCHER C, MEIER W M, OLSON D H. Atlas of zeolite framework types [M]. Amsterdam: Elsevier, 2001.
- [4] 田鹏, 许磊, 刘中民, 等. 新型磷酸硅铝分子筛 SAPO-56 的合成与表征 [J]. 高等学校化学学报, 2001, 22(6): 991-994.
- [5] 杨一青, 刘红星, 谢在库, 等. SAPO-56 分子筛的晶化历程及其催化性能 [J]. 工业催化, 2003, 11(1): 43-46.
- [6] XIE Z Z, ZHU M Q, NAMBO A, et al. Microwave-assisted synthesized SAPO-56 as catalyst in the conversion of CO_2 to cyclic carbonates [J]. Dalton Trans, 2013, 42: 6732-6735.
- [7] 詹予忠, 董佳佳, 宋孟璐, 等. SAPO-56 分子筛的形貌和粒径控制 [J]. 郑州大学学报(工学版), 2014, 35(6): 23-26.
- [8] TREACY M M J, HIGGINS J B. Collection of simulated XRD powder patterns for zeolites [M]. Amsterdam: Elsevier, 2001.

Study on Crystallization Area of SAPO - 56 Molecular Sieve

ZHAN Yuzhong, DONG Hexin, DONG Jiajia, SONG Menglu, HAN Li

(School of Chemical Engineering and Energy, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: SAPO-56 molecular sieve was synthesized hydrothermally using N,N,N',N'-tetramethyl-hexane-1,6-diamine (TMHD) as template agent, pseudo-boehmite as aluminum source, white carbon black as silicon source, and phosphate acid as phosphorus source. The crystal phase and crystallinity of product were identified by XRD. The influence of synthetic conditions on the molecular sieves was studied and the crystallization area of SAPO-56 molecular sieve was obtained. The results showed that the crystallization area of SAPO-56 was $n(0.16 < n(\text{SiO}_2/\text{M}) < 0.31, 0.35 < n(\text{Al}_2\text{O}_3/\text{M}) < 0.56 \text{ and } 0.26 < n(\text{P}_2\text{O}_5/\text{M}) < 0.45$, where $\text{M} = \text{SiO}_2 + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{P}_2\text{O}_5$. The crystallization area can be extended by adjusting the amount of water and template agent.

Key words: silicoalumino-phosphate molecular sieve; hydrothermal synthesis; crystallization area; template agent

文章编号: 1671-6833(2016)03-0036-04

草乌多糖金属配合物的制备、表征与抗癌活性研究

张茜¹, 芮瑞², 李佩佩¹, 冯翠宁¹, 雷强¹, 龙跃¹

(1. 郑州大学 化学与分子工程学院, 河南 郑州 450001; 2. 锡林郭勒盟蒙医医院 内窥镜科, 内蒙古 锡林浩特 026000)

摘要: 以水为提取溶剂从草乌中提取草乌多糖(RPS), 确定了多糖提取的最佳工艺条件: 提取温度 90℃; 提取时间 4 h; 料液比 1:50, 并以草乌多糖为配体, 制备了 4 种多糖金属配合物(RPS-Ca、RPS-Zn、RPS-Cu、RPS-Fe)。采用 MTT(噻唑蓝)法, 以配体草乌多糖为对照, 测定了 4 种多糖金属配合物对肝癌细胞(HepG2)、乳腺癌细胞(MCF-7)和结肠癌细胞(HT-29)的抑制作用。实验结果显示, 草乌多糖铜配合物对 3 种癌细胞表现出最强的抑制作用。草乌多糖铜配合物的结构经紫外光谱(UV)、红外光谱(IR)、圆二色谱(CD)、电镜扫描(SEM)和热重分析(TGA)得到表征。

关键词: 草乌; 多糖金属配合物; 制备; 表征; 抗癌活性

中图分类号: O629.1 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.008

0 引言

草乌(Radix Aconiti Kusnezoffii)为毛茛科植物北乌头的干燥块根, 是中医和蒙医的常用药^[1-3]。草乌中含有多种糖类^[4], 而近年来研究发现, 多糖具有抗肿瘤、抗病毒、抗氧化和免疫调节等多种生物学活性, 且抗肿瘤活性显著并对人体毒副作用小, 因此, 将多糖开发为新型抗肿瘤药物是目前抗肿瘤药物研究领域的热点^[5]。

在对多糖结构进行修饰时, 人们意识到多糖结构中所含有的羟基、氨基和羧基等基团可以与金属离子配位, 形成多糖金属配合物, 这样以多糖作为载体, 不但保留了多糖和金属离子各自的活性类型, 而且还可以使其活性增强, 减少其毒副作用, 缩小产品体积^[6-8]。铜配合物不仅具有抗癌活性, 还具有抗炎、抗溃疡、抗抽搐、抗糖尿病和抗诱变剂等作用^[9]。

笔者前期已经研究了草乌中氨基酸的含量和种类^[10], 且有关草乌及草乌多糖研究的文献比较多, 但草乌多糖与金属离子作用形成多糖金属配合物目前还未见报道。笔者采用水为提取溶剂和 Sevage 溶剂除蛋白的方法从草乌中提取多糖, 并优化了提取工艺, 将草乌多糖与金属离子配位合成出 4 种草乌多糖金属配合物。通过抗癌活性实

验, 筛选出的草乌多糖铜配合物对 3 种癌细胞表现出最强的抑制作用, 并对其结构进行了表征。

1 实验部分

1.1 试剂和仪器

草乌(购自内蒙古通辽市); 氢氧化钠、无水乙醇、丙酮、无水乙醚、氯化锌、氯化钙、氯化铜和氯化铁均为市售分析纯; 测试所用肿瘤细胞购自中国科学院上海生命科学研究院。

循环水式多用真空泵(SHB-III)、电子天平(CP214)、旋转蒸发器(RE5299)、透析袋(MD34)、紫外分光光度计(Perkin Elmer)、傅里叶变换红外光谱仪(Vector 22)、圆二色光谱仪(Applied Photophysics Ltd)、电镜扫描仪(JSM-7100F)、热重分析仪(STA7300)。

1.2 实验方法

1.2.1 草乌中多糖的提取

将草乌样品粉碎后, 过 250 μm 分子筛, 乙醇回流脱脂 3 h, 将其滤渣晾干备用。称取一定量干燥脱脂后的草乌样品按照一定料液比(草乌样品质量与提取溶液体积之比)加入提取溶剂(水、0.5 mol/L NaOH、0.5 mol/L HCl), 在一定温度下(60~100℃)提取 2~6 h, 过滤, 合并提取液, 浓缩至原体积的 1/5。将 5 倍量的乙醇加入到上述浓缩液中静置

收稿日期: 2015-10-20; 修订日期: 2015-11-26

基金项目: 河南省科技攻关计划资助项目(0624420031); 河南省基础研究基金资助项目(022463001)

通信作者: 龙跃(1960—), 男, 湖南长沙人, 郑州大学教授, 主要从事药物合成及天然有机化学研究, E-mail: longyue@zzu.edu.cn.

24 h,过滤,用无水乙醇、丙酮、无水乙醚洗涤沉淀,干燥.将固体用适量热水溶解,转移至分液漏斗中,加入1/3体积Sevage溶剂除蛋白质(Sevage溶剂组成为氯仿和正丁醇的摩尔比为4:1),分出上层液体,加入5倍量乙醇沉淀24 h,过滤,并用无水乙醇、丙酮、无水乙醚洗涤,干燥,得粗制多糖,称重,计算收率.

1.2.2 草乌多糖的纯化

将粗制多糖用少量热水溶解,转移至透析袋中用去离子水透析2 d.透析过程中需每12 h换水一次.透析完毕后,将袋中液体倒入烧杯中,加入5倍量乙醇沉淀24 h,过滤,并用无水乙醇、丙酮、无水乙醚洗涤,干燥,得到精品多糖.

1.2.3 多糖金属配合物的制备

取精品多糖0.5 g加入15 mL水溶解,用10%氢氧化钠溶液调节pH值在8.0~8.5,在70℃水浴下搅拌,并缓慢滴加2 mol/L氯化铜溶液.当出现絮状沉淀时立即停止滴加,反应1 h后冷却至室温离心,取其上清液.向上清液中加入5倍体积的乙醇沉淀24 h,过滤,并用乙醇、丙酮洗涤、干燥得粗制品0.52 g,然后,将粗制的多糖金属配

合物溶于20 mL去离子水中透析3 d.透析过程中需要不断换水.透析完毕后,将袋中液体倒入烧杯中,加入5倍量乙醇沉淀24 h,过滤,并用无水乙醇、丙酮、无水乙醚洗涤,干燥,得到精制草乌多糖铜配合物0.48 g.钙(Ⅱ)、锌(Ⅱ)、铁(Ⅲ)配合物的制备与上述方法相同.

2 抗癌活性的测定

2.1 实验中所用的肿瘤细胞

所用的肿瘤细胞:人肝癌细胞(HepG2)、乳腺癌细胞(MCF-7)和结肠癌细胞(HT-29).实验细胞均用改良的RPMI-1640培养基(含10%的胎牛血清和1%的双抗)在37℃的CO₂孵箱中培养(95%的氧气,5%的CO₂,保持在适当的湿度).

2.2 抗癌活性的测定

采用MTT法染色原理,向每孔中加入5 g/L的MTT溶液20 μL.4 h后弃去上清液,每孔加入DMSO 150 μL,置于摇床摇10 min使结晶物溶解.在酶标仪上测其吸光度值A(λ=490 nm),结果以复孔A的均值表示.对测得的数值进行处理,计算抑制率,结果见表1.

表1 多糖金属配合物对癌细胞的抑制率

Tab.1 Growth inhibition rates of cancer cell lines with polysaccharide metal complexes

%

化合物	人肝癌细胞(HEPG2)		乳腺癌细胞(MCF-7)		结肠癌细胞(HT-29)	
	100 μg/ml	200 μg/ml	100 μg/ml	200 μg/ml	100 μg/ml	200 μg/ml
RPS	22.80	48.55	4.68	3.13	2.65	5.22
RPS-Ca	35.60	51.46	3.60	6.91	27.14	33.13
RPS-Zn	40.77	55.91	10.11	14.09	27.13	60.40
RPS-Cu	47.78	68.98	25.73	35.29	46.13	62.77
RPS-Fe	15.30	28.20	<0	19.31	14.20	26.20

3 结果与讨论

3.1 提取条件的选择

3.1.1 提取溶剂的选择

按照一定料液比1:40,分别以水、0.5 mol/L NaOH、0.5 mol/L HCl为提取溶剂,100℃提取3 h,计算粗制多糖收率,结果见图1.

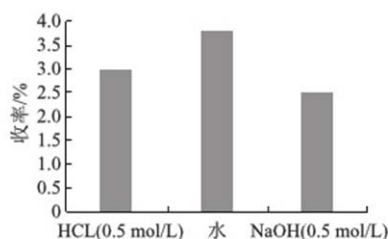


图1 不同溶剂的影响

Fig.1 Effect of different solvents

由图1可以看出,水溶剂提取多糖的收率最大,因此,选定水为提取溶剂.

3.1.2 料液比的选择

以水为提取溶剂,料液比分别为1:20、1:30、

1:40、1:50和1:60,100℃提取3 h,计算粗制多糖收率,结果见图2.

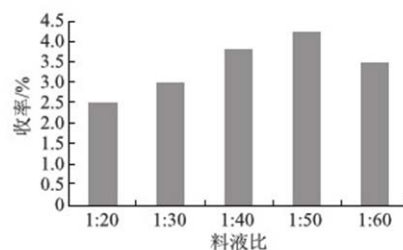


图2 料液比的影响

Fig.2 Effect of ratio of material to liquid

由图2的结果可知,当料液比为1:50时,多糖的收率最大;当料液比小于1:50时,收率随着料液比的增加而增大;当料液比超过1:50时,收率减小.

3.1.3 提取温度的选择

以水为提取溶剂,料液比为1:50,分别于60、

70、80、90、100 $^{\circ}\text{C}$ 提取 4 h, 计算粗制多糖收率, 结果见图 3。由图 3 的结果可知, 当提取温度由 60 $^{\circ}\text{C}$ 增加到 90 $^{\circ}\text{C}$ 时, 多糖收率增加明显; 当温度高于 90 $^{\circ}\text{C}$ 后, 多糖收率增加趋势减缓, 因此, 选择 90 $^{\circ}\text{C}$ 为提取温度。

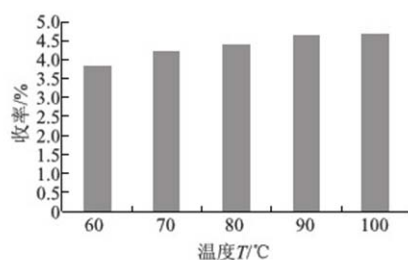


图 3 提取温度的影响

Fig. 3 Effect of extraction temperature

3.1.4 提取时间的选择

以水为提取溶剂, 料液比为 1:50, 90 $^{\circ}\text{C}$ 下提取 2、3、4、5、6 h, 计算粗制多糖收率, 结果见图 4。

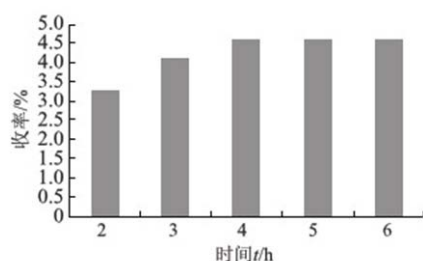


图 4 提取时间的影响

Fig. 4 Effect of extraction time

由图 4 的结果可知, 当提取时间由 2 h 增加到 4 h 时, 多糖收率增加明显; 4 h 后多糖收率增加趋势减缓, 因此, 选择 4 h 为提取时间。

3.2 抗癌活性结果

在合成的 4 种多糖金属配合物中, 多糖钙配合物、多糖锌配合物和多糖铜配合物相对于草乌多糖对 3 种癌细胞的抑制率都有很大提高, 其中多糖铜配合物的抑制作用最大。而多糖铁配合物相对于草乌多糖对人肝癌细胞 (HepG2) 的抑制率有所降低, 且浓度为 100 $\mu\text{g}/\text{ml}$ 时对乳腺癌细胞 (MCF-7) 几乎没有表现出抑制活性。

3.3 多糖金属配合物的表征

草乌多糖和草乌多糖铜配合物的红外光谱如图 5 所示。草乌多糖红外光谱图主要吸收峰的归属: 3 420 cm^{-1} 处为 $-\text{OH}$ 的伸缩振动吸收峰; 1 732 cm^{-1} 处为羰基的伸缩振动吸收峰; 1 649.82

cm^{-1} 处为 $-\text{OH}$ 的弯曲振动吸收峰。草乌多糖铜配合物的红外光谱图中主要吸收峰的归属: 3 416 cm^{-1} 处为 $-\text{OH}$ 的伸缩振动吸收峰, 与多糖相比发生少量红移; 1 648 cm^{-1} 处为羰基的伸缩振动吸收峰; 1 623 cm^{-1} 处为 $-\text{OH}$ 的弯曲振动吸收峰, 与多糖相比发生了明显的红移。

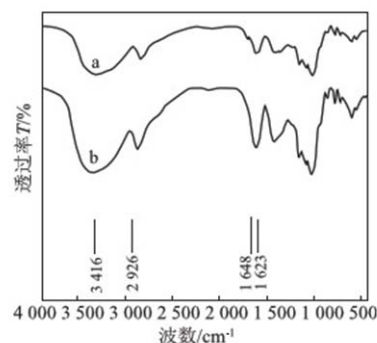


图 5 草乌多糖 (a) 和草乌多糖铜配合物 (b) 的红外光谱

Fig. 5 IR spectra of RPS (a) and RPS-Cu (b)

草乌多糖和草乌多糖铜配合物的紫外光谱如图 6 所示。可以看出, 草乌多糖的最大吸收波长在 237 nm 处, 与铜离子作用后最大吸收波长减小为 228 nm, 这是由于形成配合物之后影响了电子的跃迁, 从而导致最大吸收波长发生改变。

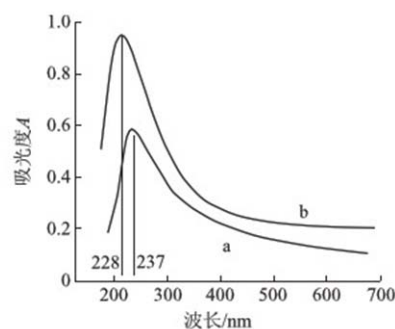


图 6 草乌多糖 (a) 和草乌多糖铜配合物 (b) 的紫外光谱

Fig. 6 UV spectra of RPS (a) and RPS-Cu (b)

观察草乌多糖和草乌多糖金属铜配合物的 CD 谱如图 7 所示。由图 7 可以发现, 波长在 200 ~ 300 nm 时谱图变化较为明显, 波长在 248 nm 附近铜配合物出现负 Cotton 效应, 而多糖并没有此种效应。

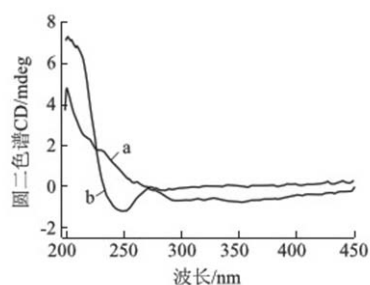


图7 草乌多糖(a)和草乌多糖铜配合物(b)的圆二色谱

Fig.7 CD spectra of RPS(a) and RPS-Cu(b)

扫描电镜是定性分析、表征化合物表面形貌的重要手段之一。草乌多糖和草乌多糖铜配合物的扫描电镜图如图8所示。从图8可以看出,配体草乌多糖呈交联网状,与铜离子配位后,呈颗粒状,配位前后表面形貌发生了显著的变化。

草乌多糖和草乌多糖铜配合物的热重曲线如图9所示。从图9可以看出,草乌多糖的第一段质

量损失在小于 177 °C (质量损失 10.62%), 草乌多糖铜配合物的第一段质量损失在小于 216 °C (质量损失 9.73%), 通过对比草乌多糖及其配合物的热重曲线可以看出,形成配合物后,多糖的热稳定性增加。综合以上结果,可以说明多糖与金属离子发生了配位。

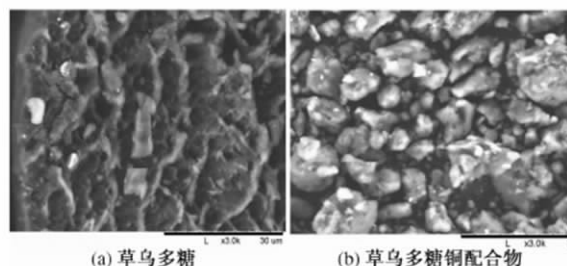
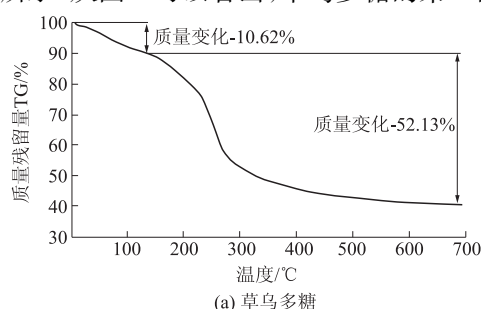
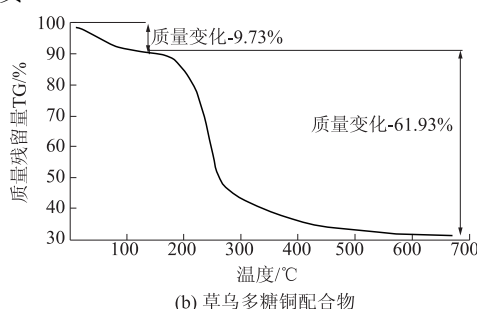


图8 草乌多糖(a)和草乌多糖铜配合物(b)的扫描电镜显微图

Fig.8 SEM micrographs of RPS(a) and RPS-Cu(b)



(a) 草乌多糖



(b) 草乌多糖铜配合物

图9 草乌多糖和草乌多糖铜配合物的热重曲线

Fig.9 TGA of RPS(a) and RPS-Cu(b)

4 结论

确定了草乌中多糖提取的最佳工艺条件: 提取溶剂为水, 提取温度 90 °C, 提取时间 4 h, 料液比 1:50。通过体外抗癌活性筛选结果发现, 实验合成了 4 种草乌多糖金属配合物, 且 4 种草乌多糖金属配合物除草乌多糖铁外, 其余均表现出比草乌多糖高的抑制活性, 其中草乌多糖铜配合物对 3 种肿瘤细胞的抑制作用最强。除此之外, 其结构经紫外光谱 (UV)、红外光谱 (IR)、圆二色谱 (CD)、电镜扫描 (SEM) 和热重分析 (TGA) 得到表征。

参考文献:

- [1] 肖培根. 川乌草乌附子 [M]. 北京: 中国中医药出版社, 2000.
- [2] 李正邦, 吕光华, 陈东林, 等. 草乌中生物碱的化学研究 [J]. 天然产物研究与开发, 1997, 9(1): 9-10.
- [3] 陈熾, 朱元龙, 朱任宏. 中国乌头的研究 [J]. 药学学报, 1965, 12(7): 435-436.
- [4] 孙玉军, 陈彦, 吴佳静. 草乌多糖的分离纯化和组成性质研究 [J]. 中国药学杂志, 2000, 35(11): 731-732.

- [5] 林俊, 李萍, 陈靠山. 近 5 年多糖抗肿瘤活性研究进展 [J]. 中国中药杂志, 2013, 38(8): 1116-1120.
- [6] 柴晓华, 王飞利, 黄洁. 金属药物研究新进展 [J]. 化学试剂, 2008, 30(2): 99-103.
- [7] 王晓晖, 白海泉, 乌兰格日乐. 多糖金属配合物的研究进展 [J]. 内蒙古民族大学学报 (自然科学版), 2014, 29(5): 516-518.
- [8] ZHU Yang, CHEN Yao, LI Qian, et al. Preparation, characterization, and anti-Helicobacter pylori activity of Bi^{3+} -Hericium erinaceus polysaccharide complex [J]. Carbohydrate polymers, 2014, 110: 231-237.
- [9] 尹富玲, 申佳, 邹佳嘉, 等. 2,2'-联吡啶和去甲基斑蝥酸根桥联双核铜(II)配合物的合成、结构表征及抗癌活性的研究 [J]. 化学学报, 2003, 61(4): 556-561.
- [10] 姚学文, 黄丽华, 雷强, 等. 内蒙古草乌中氨基酸提取工艺的研究及测定 [J]. 郑州大学学报 (理学版), 2014, 46(4): 97-100.

(下转第 43 页)

文章编号: 1671-6833(2016)03-0040-04

基于微加热器平台的高性能甲烷传感器

郭联峰^{1,2}, 许宗珂³, 段国韬³, 李 铁^{1,2}

(1. 中国科学院上海微系统与信息技术研究所, 上海 200050; 2. 微系统技术国家实验室, 上海 200050;
3. 中国科学院固体物理研究所, 安徽 合肥 230031)

摘 要: 设计制造了基于微型加热器平台(MHP)的甲烷气体传感器。微加热器平台因其功耗低、体积小等特点可广泛应用于半导体气体传感器中。微加热器平台的制作是基于IC兼容的MEMS工艺完成的, 利用模板法在MHP上原位制备二氧化锡(SnO_2)有序多孔薄膜得到微纳融合气体传感器。利用这种方法制造的传感器功耗仅39 mW, 响应时间2 s, 对714 mg/ m^3 甲烷的响应可达到1.19, 对甲烷的探测下限可达18 mg/ m^3 。此高性能、低成本的传感器有望在生产生活、安全监控等方面得到广泛应用。

关键词: 甲烷传感器; 微加热器平台; 原位制备二氧化锡; 模板法; 微纳融合

中图分类号: TP212.2 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.009

0 引言

随着工业现代化的发展和人们生活水平的不断提高, 易燃、易爆、有毒有害气体的检测对于日常生活、安全监控、环境保护和系统过程控制等方面显得越来越重要。甲烷(CH_4)是天然气、沼气和多种液体燃料的主要成份, 在工业领域和日常生活中广泛应用, 是典型的易燃易爆气体, 使得对于甲烷的检测和监控愈发得到社会的关注。高性能、低成本的甲烷传感器研究也一直是气体传感器领域的热点。

在众多的甲烷检测装置中, 金属氧化物半导体(MOS)式的传感器具有体积小、结构简单、价格低廉等优点, 常规的MOS气体传感器基于陶瓷管和厚膜工艺, 功耗在百毫瓦量级, 响应时间为几十秒甚至更长, 且探测下限一般为几百到几千毫克每立方米, 很难满足对更低浓度目标气体的快速检测。

近年来, 基于微机电系统(MEMS)技术制造的微型气体传感器有望实现低成本的MOS气体传感器^[1-3], 其中微加热器平台的设计与制造成为气体传感器的重要环节之一。Ehmann等^[4]用多晶硅作为加热材料得到封闭膜式微加热器, 但热稳定性较差, 功耗较大; Belmonte等^[5]设计的四

悬梁微加热器平台功率可降低到50 mW左右, 但这对于手持设备等应用功耗依然很高; 近年来, 上海微系统所李铁课题组通过优化设计制造了二悬梁二维和三维微加热器, 大大降低了功耗, 其中二维加热器加热到400℃仅需18 mW^[6], 三维加热器由于独特的结构加热效率更是远高于二维平面加热器^[7], 为研制基于微加热器的气体传感器提供了良好的平台。

笔者设计制作了以铂作为加热电阻丝的微加热器平台(MHP), 并利用模板法在MHP上原位制备二氧化锡(SnO_2)敏感材料。此种将微加热器平台与纳米敏感材料融合的方法同时结合了MEMS微加热器平台小型化、低功耗等特点和纳米材料高比表面积、高灵敏性的特性, 使得制备的传感器功耗低、体积小、灵敏度高、响应时间快, 并且显示了大规模生产潜力, 为设计与研制下一代小型化、集成化的高性能气体传感器提供了新的途径。

1 传感器设计与制备

笔者提出了基于微加热器平台的微纳融合传感器, 将纳米级的敏感材料 SnO_2 原位制备于微加热器平台上, 如图1所示。

1.1 微加热器平台制造

微加热器平台的制作是基于MEMS工艺完

收稿日期: 2016-01-10; 修订日期: 2016-02-25

基金项目: 国家科技支撑计划课题(2012BAJ11B01); 国家自然科学基金创新群体项目(61321492); 国家自然科学基金重大研究计划集成项目(91323304)

作者简介: 郭联峰(1989—), 男, 山西晋中人, 中国科学院博士研究生, 主要从事MEMS的气体传感器研究, E-mail: glfre@mail.sim.ac.cn.

成的. 选用(100)晶面的硅片作为衬底,通过热氧化和低压化学气相沉积制备二氧化硅和氮化硅复合膜作为支撑膜;利用剥离工艺(lift-off)制作铂加热丝,厚度为200~300 nm,在铂之前先沉积20 nm的钛作为粘附层,增加加热丝和衬底的粘附性;利用等离子增强化学气相沉积制作氮化硅作为绝缘层,绝缘层厚度为400 nm;然后通过反应离子刻蚀将绝缘层刻蚀,露出下面的加热丝电极;同样利用剥离工艺(lift-off)制作叉指电极;最后利用反应离子刻蚀彻底刻蚀氧化硅和氮化硅复合膜得到腐蚀窗口,然后用各向异性湿法腐蚀液,如四甲基氢氧化铵或氢氧化钾等,对结构进行释放,释放所需时间为5~8 h. 工艺流程图如图2所示.

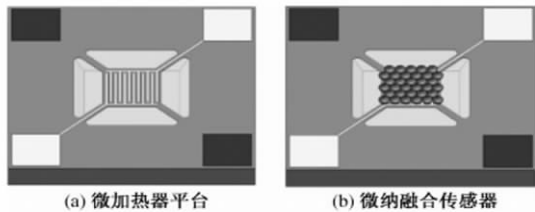


图1 微纳融合气体传感器

Fig. 1 Micro-nano gas sensor

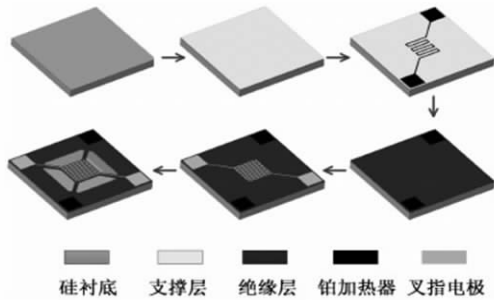


图2 微加热器平台的工艺流程

Fig. 2 Fabrication process of the MHP

1.2 在微加热器平台上原位制备 SnO_2 薄膜

传感器的敏感材料 SnO_2 是通过模板法在微加热器平台上原位制备的. 图3给出了敏感材料的合成流程图. 模板法以二维密排的胶体球(如聚苯乙烯微球、二氧化硅微球等)组成的单层胶体球作为模板,通过溶液提拉法、溅射等在模板上沉积所需的物质,然后加热去除模板球,得到有序多孔薄膜^[8-10]. 本次实验中采用的是直径500 nm的聚苯乙烯(PS)模板球,具体实施方法为:把载玻片上的单层模板球转移到浓度 $c(\text{SnCl}_4)$ 为 0.1 mol/dm^3 的前驱液中;然后用微加热器平台将模板球从前驱液中提拉出来,在提拉的同时,模板球与微加热器平台之间由于毛细管力效应,会充满前驱液,正是这些溶液形成最后的 SnO_2 多孔膜;将制备好的片子静置10 min左右,然后放入120℃的烘箱中,干燥30 min;最后把器件在空气气氛中的退火炉中退火,在400℃下保温2 h去除模

板球,最后在微加热器平台上制备得到了单层多孔的纳米敏感膜. 图4给出了制备的传感器结构和表面形貌 SEM. 由图4可以看出,制备的薄膜均匀、连续,呈六角密排,且疏松多孔,有利于目标气体的快速渗透.

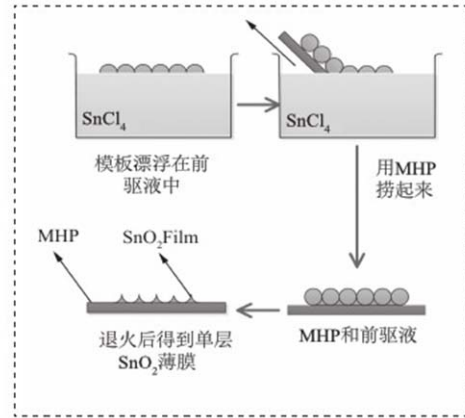


图3 在微加热器平台上原位制备敏感膜

Fig. 3 In-situ fabrication process of sensing film on the MHP

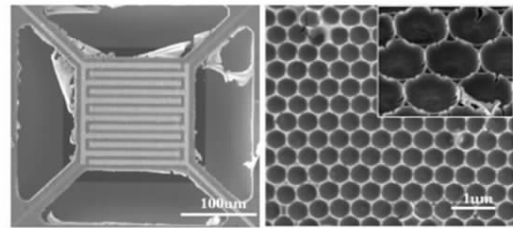


图4 制备得到的二氧化锡敏感膜的扫描电镜图片

Fig. 4 SEMs of the as-fabricated tin dioxide films

2 气体传感器性能

2.1 温度功耗关系

测试传感器的温度功耗关系如图5所示. 从图5很容易得出,传感器在350℃下功耗仅为39 mW,远远小于商用传感器的功率(TGS2611,大约280 mW),这正是由于采用悬梁式的微加热器平台,大大减少了微加热器平台热量的耗散.

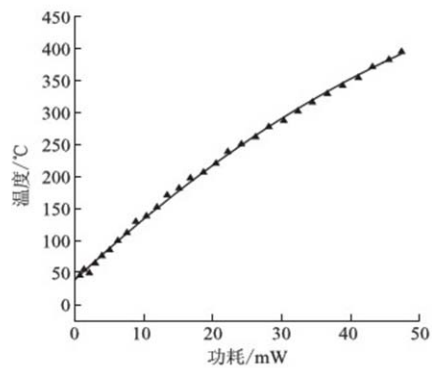


图5 传感器温度功耗关系

Fig. 5 Power versus temperature relationship of the sensor

2.2 气体传感器对甲烷的响应

传感器的灵敏度定义为敏感膜在空气中的电阻和在甲烷中电阻的比值. 图 6 给出了传感器在 350 °C 下对不同浓度 (714、1 428、2 142、2 856、3 570、7 140、14 280、21 420 mg/m^3) 的甲烷的灵敏度, 并且给出了响应随时间变化的关系. 可以看出, 传感器对甲烷的响应和恢复都很快, 响应-恢复时间约为 2 s, 这个可以从两个方面进行解释: ①微加热器平台提供了稳定的工作温度; ②有序多孔的纳米材料使得气体能够快速地渗透敏感膜, 达到平衡, 使输出信号趋于稳定.

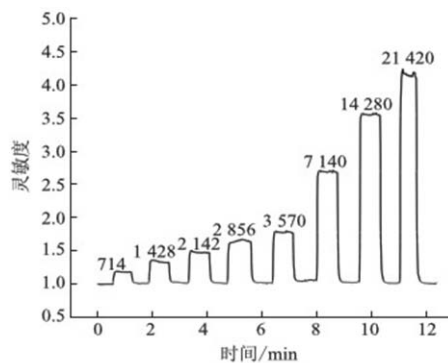


图 6 350 °C 下不同浓度的响应随时间的变化

Fig. 6 Response versus time relationship for different concentration at 350 °C

笔者测试了传感器在不同温度下对不同浓度甲烷的响应, 结果如图 7 所示. 可以看出, 250 °C 时传感器对甲烷的响应很小, 随着温度的增大, 传感器灵敏度不断增大; 在 250 ~ 350 °C 内, 350 °C 时灵敏度达到最大. 将 350 °C 时灵敏度与浓度的关系进行了线性拟合, 如图 8 所示. 根据信号检测的要求, 信号 (S) 至少是噪声 (N) 的 3 倍, 由图 6 可以看出, 噪声很小. 通过实验观测可知, 噪声仅为 0.004, 通过线性拟合可推测此微纳融合气体传感器的探测下限可达到 18 mg/m^3 .

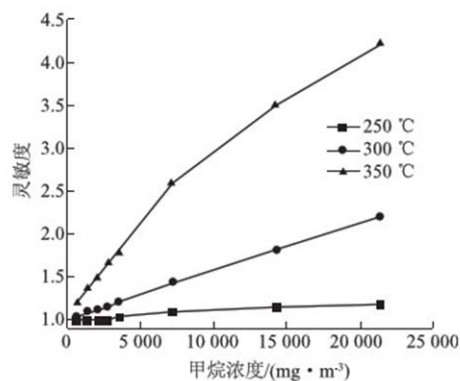


图 7 传感器在不同温度下对不同浓度的甲烷的灵敏度
Fig. 7 Sensitivity versus concentration relationship at different temperatures

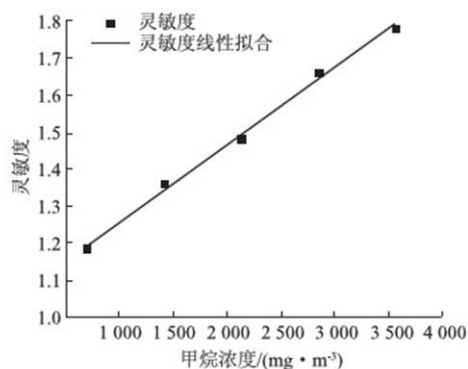


图 8 350 °C 下传感器探测下限的线性拟合

Fig. 8 Liner fit for detection limit of the sensor at 350 °C

3 结论

基于微型加热器平台设计制作了微纳融合气体传感器. 利用模板法在 MHP 上原位制备二氧化锡 (SnO_2) 有序多孔薄膜得到高性能的甲烷传感器. 此传感器功耗仅 39 mW, 响应时间仅需 2 s, 对浓度为 714 mg/m^3 甲烷的灵敏度可达到 1.19, 探测下限可低至 18 mg/m^3 . 此高性能传感器有望在安全监控、环境保护等方面得到广泛应用.

参考文献:

- [1] SYSOEV V V, BUTTON B K, WEPSIEC K, et al. Toward the nanoscopic "electronic nose": Hydrogen vs carbon monoxide discrimination with an array of individual metal oxide nano and mesowire sensors [J]. Nano letters, 2006, 6(8): 1584 - 1588.
- [2] SYSOEV V V, GOSCHNICKJ, SCHNEIDER T, et al. A gradient microarray electronic nose based on percolating SnO_2 nanowire sensing elements [J]. Nano letters, 2007, 7(10): 3182 - 3188.
- [3] ARONOVA M A, CHANG K S, TAKEUCHI I, et al. Combinatorial libraries of semiconductor gas sensors as inorganic electronic noses [J]. Applied physics letters, 2003, 83(6): 1255 - 1257.
- [4] EHAMANN M, RUTHER P, VON ARX M, et al. Operation and short-term drift of polysilicon-heated CMOS microstructures at temperatures up to 1200 K [J]. Journal of micromechanics and microengineering, 2001, 11(4): 397 - 401.
- [5] BELMONTE J C, PUIGCORBE J, ARBIOL J, et al. High-temperature low-power performing micromachined suspended micro-hotplate for gas sensing applications [J]. Sensors and actuators B-chemical, 2006, 114(2): 826 - 835.
- [6] XU Lei, LI Tie, GAO Xiuli, et al. Development of a

- reliable micro-hotplate with low power consumption [J]. IEEE Sensors Journal, 2011, 11(4): 913–919.
- [7] XU Lei, LI Tie, WANG Yuelin. A novel three-dimensional microheater [J]. IEEE Electron device letters, 2011, 32(9): 1284–1286.
- [8] DUAN Guotao, CAI Weiping, LUO Yuanyuan, et al. A hierarchically structured Ni(OH)₂ monolayer hollow-sphere array and its tunable optical properties over a large region [J]. Advanced functional materials, 2007, 17(4): 644–650.
- [9] LI Yue, CAI Weiping, DUAN Guotao. Ordered micro/nanostructured arrays based on the monolayer colloidal crystals [J]. Chemistry of materials, 2008, 20(3): 615–624.
- [10] DUAN G T, LV Fangjing, CAI Weiping, et al. General synthesis of 2d ordered hollow sphere arrays based on nonshadow deposition dominated colloidal lithography [J]. Langmuir, 2010, 26(9): 6295–6302.

High Performance Methane Gas Sensor Based on Micro – hotplatform

GUO Lianfeng^{1,2}, XU Zongke², DUAN Guotao³, LI Tie^{1,2}

(1. Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China; 2. Science and Technology on Microsystem Laboratory, Shanghai 200050, China; 3. Institute of Solid State Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China.)

Abstract: High performance methane gas sensor based on micro-hotplatform (MHP) was designed and fabricated. MHP is widely used in semiconductor gas sensor because of its low power consumption, small volume characteristics. The MHP is fabricated based on IC compatible MEMS technology. Micro-nano gas sensor was prepared through in-situ fabrication of tin dioxide using template method. The power consumption of the sensor is only 39 mW, and the response time is 2 s, and the sensitivity to 714 mg/m³ methane is as high as 1.19. Because of high signal noise ratio, the detection limit is estimated to be 18 mg/m³ through liner fit. The high performance and low cost sensor is expected to be widely used in industry and safety monitoring.

Key words: methane gas sensor; micro-hotplatform; tin dioxide in-situ fabrication; template method; micro/nano fusion

(上接第39页)

Preparation, Characterization, and Anticancer Evaluation of Inner Mongolia Radix Aconiti Kusnezoffii Polysaccharide Metal Complexes

ZHANG Xi¹, RUI Rui², LI Peipei¹, FENG Cuining¹, LEI Qiang¹, LONG Yue¹

(1. College of Chemistry and Molecular Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China; 2. Department of Endoscopy, Xilinguole Meng Mongolian General Hospital, Xilinhot 026000, China)

Abstract: By using water as extraction reagent, the polysaccharides in Radix Aconiti Kusnezoffii were extracted. The results showed that optimum extraction condition was 90℃, 4 h, and liquid to material ratio 1:50. Four polysaccharide complexes were prepared using four metal ions (Ca²⁺, Zn²⁺, Cu²⁺, Fe³⁺) and polysaccharides from Radix Aconiti Kusnezoffii, respectively. All complexes were evaluated for biological activity against three human cancer cell lines (HepG2, MCF-7 and HT-29) by the standard MTT method, and the results showed that PRS-Cu possessed the highest growth inhibitory effects. The complex was characterized by UV, IR, CD, SEM, and TGA.

Key words: radix aconiti kusnezoffii; polysaccharide metal complex; preparation; characterization; anticancer activity

基于 COMSOL Multiphysics 的静电纺丝电场分析

刘正华¹, 王 兢¹, 杜海英^{1,2}

(1. 大连理工大学 电子科学与技术学院, 辽宁 大连 116023; 2. 大连民族学院 机电信息工程学院, 辽宁 大连 116605)

摘 要: 针对静电纺丝过程难以控制这一问题, 应用 COMSOL Multiphysics 软件, 采用矢量图、等高线图等方法描述电场的分布, 对多种条件下静电纺丝中纺丝装置的电场进行仿真, 并预测轨迹的分布, 包括普通的静电纺丝、以及增加平板形、环形等不同形状辅助电极的情况. 计算与分析结果表明, 辅助电极的加入对电场的分布产生了较大的影响. 最后, 使用加入平行辅助电极的静电纺丝装置进行了纺丝实验, 得到的椭圆形沉积图案与相应的仿真结果一致.

关键词: 静电纺丝; 电场仿真; 半导体传感器; 有限元分析; COMSOL Multiphysics

中图分类号: TQ340.64; TS151 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.010

0 引言

静电纺丝技术广泛地应用于生物组织工程、有机高分子聚合物的合成, 以及无机纳米材料的合成等许多领域^[1]. 通过对静电纺丝过程参数的控制, 科研人员成功地制备出了多种形貌的纳米纤维, 包括纳米线、纳米管、纳米带、纳米棒等. 为了对静电纺丝的取向进行控制, 科研人员通过改变接收极等方式制备了取向一致的静电纺丝, 拓展了静电纺丝的应用范围^[2]. 静电纺丝的过程十分复杂, COMSOL Multiphysics 或 Ansoft 等有限元工具软件已广泛用于静电纺丝装置电场分布的仿真分析.

基本的静电纺丝装置由高压电源、带喷丝头的容器和接收极板三部分组成, 如图 1 所示. 静电纺丝过程中, 在高压电源的偏置下, 纺丝前驱液在针头端形成泰勒锥并喷射出来, 形成纤维状的喷射细流. 充满电荷的喷射细流在电场力、表面张力、黏弹力及库仑力等多个力的作用下向收集板运动. 在纤维的运动过程中, 由于一系列不稳定过程, 纤维不断劈裂拉伸, 同时由于有机溶剂的挥发, 纤维直径不断减小, 最终, 在收集板上形成了无纺布式的二维纳米结构.

基本的静电纺丝装置结构简单, 但很多条件

下基本的静电纺丝装置并不能满足减小沉积面积等需求, 需要添加辅助电极^[3]或者采用同轴喷头等方法^[4]. CUI 等^[5]应用 COMSOL Multiphysics 软件对静电纺丝装置的电场进行分析, 并根据仿真结果改进了仿真装置成功地抑制了静电纺丝过程中纤维的发散趋势. YE 等^[6]应用 Ansoft Maxwell 软件对电场进行仿真, 分析了鸟巢状结构纳米纤维膜产生的原因.

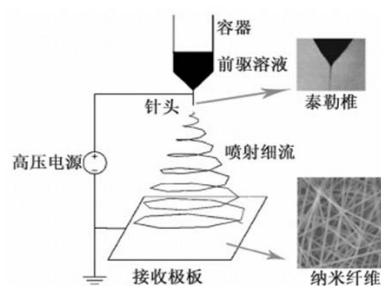


图 1 基本的静电纺丝装置示意图

Fig. 1 Basic electrospinning device

为了分析添加环形辅助电极和平板辅助电极下的电场分布, 并预测沉积区域的分布, 采用 COMSOL Multiphysics 软件对多种条件下静电纺丝中的电场进行了计算与分析, 并在仿真结果的指导下进行了实验.

1 电场分析方法

静电场可以根据泊松方程及边界条件进行准

收稿日期: 2015-12-01; 修订日期: 2016-01-22

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61574025, 61131004, 61501081)

通信作者: 王兢(1955—), 女, 辽宁沈阳人, 大连理工大学教授, 博士生导师, 主要从事传感器及敏感材料研究,

E-mail: wangjing@dlut.edu.cn.

确的解析计算,但由于静电纺丝装置的复杂性,描述静电纺丝装置电场的方程不存在解析解.为了解决这一问题,可以对静电纺丝装置的电场进行简化或者应用数值方法求解近似值.单针头静电纺丝装置的电场可以被简化为匀强电场,匀强电场方向由针头指向极板,电场强度为^[7]

$$E = v/D. \quad (1)$$

式中: E 为电场强度; v 为针头电压; D 为针头与极板间距离.显然,这种简化难以准确地描述静电场的分布.若纺丝装置中添加了辅助极板,简化后的电场公式仍然较为复杂^[8],且误差较大,因此,应用数值方法求解近似值是更好的解决方法.

笔者应用 COMSOL Multiphysics 对单针头静电纺丝装置、添加了环形辅助电极以及添加了平行辅助电极的静电纺丝装置的电场进行了仿真计算,应用 COMSOL Multiphysics 中的 AC/DC 模块,对静电纺丝装置进行建模,定义材料,施加激励.

2 电场分析在不同纺丝环境下的应用

2.1 单针头静电纺丝装置的电场分析

首先定义一个长宽都为 22 cm,高度为 16 cm 的长方体,所有对电场的计算都在这个范围内进行,以在保证计算精度的前提下减少仿真的计算量;然后定义接收极板为长宽都为 16 cm 的正方形,其厚度为 2 mm;最后定义针头为半径 0.5 mm,高度为 1 cm 的圆柱体.

根据设置的参数,建立仿真的几何模型,并定义除针头与极板以外的区域为空气,定义针头和极板为铜,参数如表 1 所示.

表 1 介质参数表
Tab.1 Media properties

参数	空气	铜
相对介电常数	1	1
相对导磁率	1	1
表面发射率	—	0.5
电导率/($\text{s} \cdot \text{m}^{-1}$)	0	$5.998\text{e}+7$
参考电阻率/($\Omega \cdot \text{m}$)	—	$1.72\text{e}-8$

对针头施加电压为 13.3 kV 的激励,接收极板接地,并进行网格划分,得到经过原点的 yz 平面电场分布图如 2 所示.

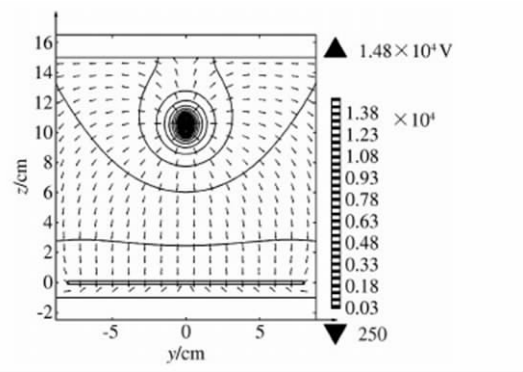


图 2 单针头静电纺丝装置 yz 平面电场分布示意图

Fig.2 Electric field orientation of yz -plane in single-needle electrospinning device

从图 2 可以看出,单针头静电纺丝装置的电场分布较有规律,针头附近的电场呈辐射状指向四周;靠近极板部分的电场则较为均匀,类似匀强电场.另外,针头附近密集的电位等高线说明针头附近电位下降很快,电场很强,而极板附近稀疏的等高线表明电场强度较低.显然,将单针头静电纺丝装置的电场简化为匀强电场是不准确的,会对计算造成一定误差,这是因为静电纺丝过程中的喷射细流带有电荷,会受电场的影响.从文献[9]可知,在单针头静电纺丝装置中,喷射细流的轨迹为螺旋状.从实验可知,单针头静电纺丝会在锡纸上沉积为一个圆形的区域.但有时由于对纺丝效果的要求不同,或者需要对静电纺丝进行控制,如控制纺丝的沉积面积,单针头静电纺丝装置就无法满足要求,需要添加合适的辅助电极.

2.2 添加环形辅助电极的静电纺丝装置的电场仿真

环形电极通常用来约束静电纺丝的发散程度,其通常位于针头与极板之间,并施加独立的偏置电压.图 3 所示为一个添加了环形辅助电极的静电纺丝装置几何模型.其中,针头与极板间距离为 10 cm,针头施加 13.3 kV 电压,环形电极直径 3 cm,高 1 cm,施加 11 kV 电压,且环形电极下缘高度为 8 cm.

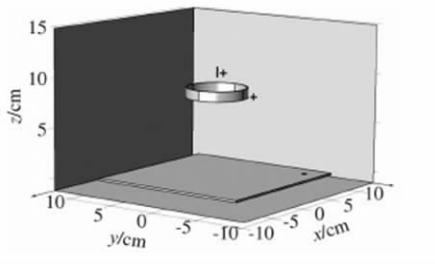


图 3 添加环形辅助电极的静电纺丝装置几何模型

Fig.3 Geometry model of electrospinning device with circle auxiliary electrode

经过原点的 yz 轴截面电场分布如图 4 所示, 与图 2 相比, 电场在环形电极的内部发生了弯曲, 在环形电极以下的部分, 电场的发散趋势相对较小. 而且从图 2 可以看出, 电场在针头附近的发散程度最高, 环形电极放置在距离针头较近的位置能取得较好的效果. 对比两图的电位等高线可见, 辅助电极的引入使电位的下降缓和, 针头附近的电场减小. 在环形电极的作用下, 带电纤维的运动会受到一定程度上的抑制, 沉积面积也会因此减小, 这与文献 [8] 中的实验结果一致.

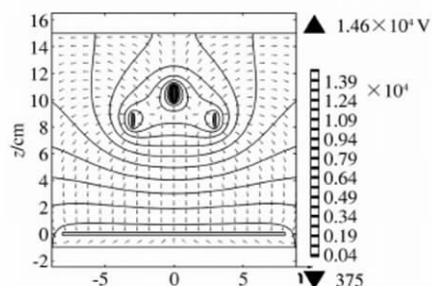


图 4 添加环形辅助电极的静电纺丝装置 yz 截面电场方向示意图

Fig. 4 Electric field orientation of yz -plane in electrospinning device with circle auxiliary electrode

2.3 添加平行极板的静电纺丝装置的电场仿真

为了控制接收的静电纺丝沉积纤维的形状, 需要在静电纺丝装置中添加平行极板. 对这种具有平行板辅助电极的纺丝进行建模和仿真, 其装置几何模型如图 5 所示. 针头距离极板 10 cm 并施加 13.3 kV 电压, 接收极板接地. 两个辅助极板高 2 cm, 宽 5 cm, 厚 0.2 cm, 并都施加 10 kV 电压. 两个辅助极板都平行于 xz 平面且到 z 轴的距离都为 3 cm.

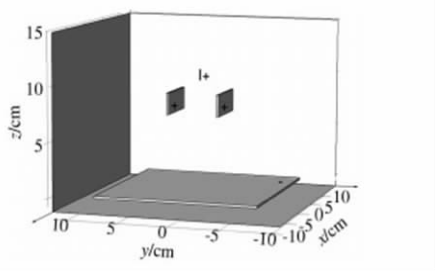


图 5 添加了平行辅助电极的静电纺丝装置几何模型图

Fig. 5 Geometry model of electrospinning device with parallel auxiliary electrodes

为了更直观地观察添加了辅助极板后的电场分布, 分别截取了经过原点的 yz 平面和 xz 平面. 其中, yz 截面的电场的仿真结果如图 6 所示, xz 截面的电场仿真结果如图 7 所示. 从图 6 可见, 辅助极板附近的电场方向有明显的改变, 电场线有聚拢的趋势, 两极板间的电场方向指向轴心, 这一趋势会使带电的喷射细流沿 y 轴的运动受到抑

制. 而图 7 所示为 xz 截面的电场, 与图 2 相比, 极板附近的电场没有受到极板的影响, 电场方向与加入极板之前基本一致, 所以带电的喷射细流沿 x 轴的运动不会受到抑制. 因此, 由于辅助极板的作用, 静电纺丝的沉积结果应该为椭圆形.

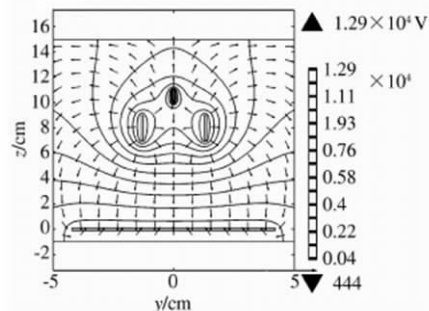


图 6 添加了平行辅助电极的静电纺丝装置 yz 截面电场方向示意图

Fig. 6 Electric field orientation of yz -plane in electrospinning device with parallel auxiliary electrodes

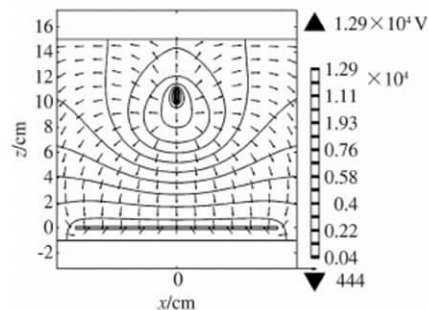


图 7 添加平行辅助电极的静电纺丝装置 xz 截面电场方向示意图

Fig. 7 Electric field orientation of xz -plane in electrospinning device with parallel auxiliary electrodes

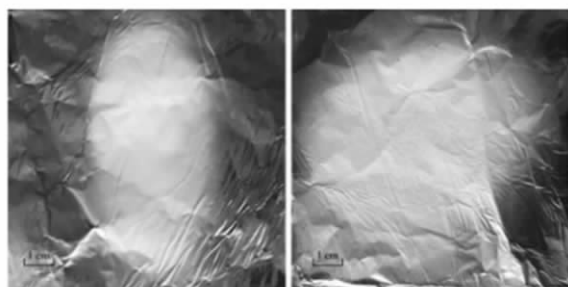
为了验证仿真分析的正确性, 笔者进行了带有平行极板辅助电极的静电纺丝实验, 其装置如图 8 所示.



图 8 添加了平行辅助电极的静电纺丝实验装置图

Fig. 8 Experiment device of electrospinning with parallel auxiliary electrodes

图9中(a)图给出添加了平行辅助极板后的静电纺丝沉积在铝箔上的照片,展现出了明显的椭圆形;图9(b)为未添加辅助极板的静电纺丝沉积在铝箔上的照片,沉积面积相对较大,且呈圆形。由此可见,实验结果与理论分析一致。



(a) 添加平行辅助电极后 (b) 添加平行辅助电极前

图9 静电纺丝沉积示意图

Fig.9 Fiber deposition area of different electrospinning devices

3 结论

静电纺丝技术成本低廉,效果良好,但由于其原理的复杂性与过程的不可控性,限制了其应用的范围。笔者采用 COMSOL Multiphysics 软件对单针头静电纺丝装置、添加了环形辅助电极以及添加了平行极板的静电纺丝装置电场进行了建模与仿真。根据仿真结果截取的不同平面,直观地分析了电场的分布,分析了纺丝的沉积趋势,并通过实验验证了仿真的准确性。仿真结果表明,基于 COMSOL Multiphysics 的电场仿真有着仿真结果准确,可以应对复杂模型等优点。

参考文献:

- [1] LI Z P, FAN Y J, ZHAN J H. In_2O_3 nanofibers and nanoribbons: Preparation by electrospinning and their formaldehyde gas-sensing properties [J]. *European Journal of inorganic chemistry*, 2010 (21): 3348 - 3353.
- [2] LI D, WANG Y L, XIA Y N. Electrospinning nanofibers as uniaxially aligned arrays and layer-by-layer stacked films [J]. *Advanced materials*, 2004, 16(4): 361 - 366.
- [3] ARRAS M M L, GRASL C, BERGMEISTER H, et al. Electrospinning of aligned fibers with adjustable orientation using auxiliary electrodes [J]. *Science and technology of advanced materials*, 2012, 13(3): 035008.
- [4] 司军辉,崔志香,刘琼,等. 静电纺丝制备 PLA - PCL 核 - 壳结构复合纤维 [J]. *郑州大学学报(工学版)*, 2015, 36(5): 20 - 24.
- [5] CUI X J, LI L M, XU F. Controlled assembly of poly (vinyl pyrrolidone) fibers through an electric-field-assisted electrospinning method [J]. *Applied physics A*, 2011, 103(1): 167 - 172.
- [6] YE X Y, JIN Y N, HUANG X J, et al. Simulation of electrical field for the formation mechanism of Bird's Nest patterned structures by electrospinning [J]. *Chinese journal of polymer science*, 2013, 31(3): 514 - 520.
- [7] RENEKER D H, YARIN A L, FENG H, et al. Bending instability of electrically charged liquid jets of polymer solutions in electrospinning [J]. *Journal of applied physics*, 2000, 87(9): 4531 - 4547.
- [8] KARATAY O, DOGAN M, UYAR T, et al. An alternative electrospinning approach with varying electric field for 2D-aligned nanofibers [J]. *IEEE Transactions on nanotechnology*, 2014, 13(1): 101 - 108.
- [9] KARATAY O, DOGAN M. Modelling of electrospinning process at various electric fields [J]. *Micro & nano letters*, 2011, 6(10): 858 - 862.
- [1] LI Z P, FAN Y J, ZHAN J H. In_2O_3 nanofibers and nanoribbons: Preparation by electrospinning and their

Electric Field Analysis in Electrospinning Based on COMSOL Multiphysics

LIU Zhenghua¹, WANG Jing¹, DU Haiying^{1,2}

(1. College of Electronic Science and Technology, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China; 2. College of Mechanical and Electronic Engineering, Dalian Nationalities University, Dalian 116605, China)

Abstract: In order to solve the problem that electrospinning process is hard to control, FEA tool software COMSOL Multiphysics was used to simulate the the electric field orientation within the electrospinning. Based on the vector maps and contour lines, the electric fields distribution was analyzed. Which includes single-needle electrospinning device, electrospinning device with circle and orparallel auxiliary electrodes. Experiment with parallel auxiliary electrodes was conducted, and the deposition area with the ellipse shape matched the simulation result.

Key words: electrospinning; electric field simulation; semiconductor sensor; FEA; COMSOL Multiphysics

文章编号: 1671-6833(2016)03-0048-04

铜掺杂氧化锡的制备及其气敏性能研究

胡 骏¹, 葛美英¹, 尹桂林^{1,2}, 杨 帆², 何丹农^{1,2}

(1. 纳米技术及应用国家工程研究中心, 上海 200241; 2. 上海交通大学 材料科学与工程学院, 上海 200240)

摘 要: 利用 PVP 为表面活性剂, 将氯化亚锡和氯化铜溶解在草酸水溶液中, 通过简单温和的一步水热法, 制备了铜掺杂的氧化锡, 采用 XRD、SEM、TEM 等测试手段对材料的结构和形貌进行了表征, 并使用气敏测试设备 WS-30A 系统研究了氯化铜的掺杂比例在 0~20% 时对材料气敏性能的影响。结果表明, 适宜比例的铜掺杂二氧化锡气敏传感器对硫化氢气体具有很好的气敏响应性能, 掺杂比例为 10% 时可以显著改善气敏元件响应时间、恢复时间、选择性和稳定性, 且最佳响应温度大幅度降低, 最低在 180 ℃。最后, 讨论了铜掺杂对氧化锡气敏性能增强的机理。

关键词: 水热法; 铜掺杂 SnO_2 ; 硫化氢; 气敏性能

中图分类号: TB383.1

文献标志码: A

doi: 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.011

0 引言

随着纳米技术的日新月异, 与半导体气敏材料紧密相关的研究已经成为热门课题, 而随后的商品化驱使半导体气敏元件飞速发展^[1]。常用半导体材料如: SnO_2 、 ZnO 、 WO_3 、 In_2O_3 、 Fe_2O_3 、 ZnS-nO_3 等陆续在气敏传感器上开发使用^[2]。其中, 宽禁带半导体材料 SnO_2 (3.6 eV) 以其独特的结构和性能在气敏传感器领域得到了广泛的应用, 且世界上第一个 SnO_2 半导体气敏传感器可以追溯到 40 多年前。但是, SnO_2 基气体传感器容易表现出热稳定性差和选择性差等缺点, 所以提高 SnO_2 基气体传感器的灵敏度和选择性是满足气体传感器日益智能化的一项重要课题^[3]。实际应用中, 气敏增强的方法可以总结为: 增加半导体气敏材料的表面积和表面缺陷, 使周围环境对其气敏性能产生更强烈的影响。随后研究人员发现, 贵金属作增敏剂能显著增加半导体气敏材料的表面缺陷, 并提高其气敏性能指标, 所以添加合适的添加剂已成为改善气敏性能的有效途径之一。目前, 已有大量文献研究报道了以 SnO_2 为基材的掺杂实验, 例如: 掺入不同的阳离子掺杂剂 Au、Pd、In、Ag 等^[4]。阳离子掺杂剂如贵金属阳离子, 作为催化活性中心能降低被测气体化学吸附的活化能, 有效提高元件的灵敏度和缩短响应时间, 且掺杂剂

不同可导致吸附不同的试样, 从而具有选择性^[5]。但贵金属不仅昂贵而且严重污染环境, 掺杂剂的中毒也会使元件的长期可靠性受到损害, 因此开发其他掺杂剂也是未来发展方向之一。本实验选用廉价的铜盐作为掺杂物, 经过一步水热反应, 获得铜离子掺杂的 SnO_2 纳米颗粒, 后续的气敏测试结果显示, 铜离子掺杂的 SnO_2 气敏传感器对硫化氢表现出优良的响应度和选择性。

1 试验方案

1.1 试验原材料

二水合氯化亚锡 ($\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), 二水合草酸 ($\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$), 氯化铜 (CuCl_2) 和聚乙烯吡咯烷酮 (PVP), 去离子水, 无水乙醇, 所有试剂均购自国药且为分析纯。

1.2 材料的制备

铜掺杂氧化锡的具体制备过程: ①各称取适量聚乙烯吡咯烷酮 ($k=30$) 和二水合草酸, 加入 100 mL 烧杯, 用量筒量取 60 mL 去离子水加入烧杯作为溶剂, 将烧杯放在磁力搅拌器上磁力搅拌 30 min 左右至反应物完全溶解; ②再分别称取掺杂比例 0%、10% 和 20% 的氯化铜和二水合氯化亚锡, 溶于澄清溶液中, 磁力搅拌器上磁力搅拌至再次完全溶解; ③将反应溶液倒入 100 mL 的聚四氟乙烯水热反应釜中, 放入电加热恒温水热箱中, 设定水热反应温度为 150 ℃, 水热恒温反应时间

收稿日期: 2015-11-20; 修订日期: 2016-01-20

基金项目: 科技部国际合作项目 (KY201302007)

通信作者: 何丹农 (1956—), 男, 上海人, 上海交通大学教授, 博士生导师, 主要从事纳米材料研究, E-mail: hdn_nercn@163.com.

24 h; ④反应完成之后的水热釜在恒温水热箱中自然冷却,用去离子水和无水乙醇分别离心、洗涤、分离产物数次,洗净的产物最后用恒温鼓风干燥机在 60 ℃ 干燥产物直至乙醇完全挥发。

1.3 材料的表征

采用场发射扫描电镜(SEM, Hitachi S-4800, 加速电压 25 kV, 配备 EDS) 对样品的表面形貌、粒径及团聚程度进行观察; 透射电镜(TEM, HR-TEM, JEM-2100F, 加速电压 100 kV) 对样品的微观结构进行表征, 并进行选区电子衍射(SAED) 分析; 样品晶体用 X 射线衍射仪(XRD, D/max-2600PC, $\text{CuK}\alpha$ $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$, 管电压 40 kV, 管电流 250 mA, 扫描范围 2θ 为 $20^\circ \sim 80^\circ$) 进行表征, 样品光学性质用紫外吸收光谱(UV-vis, Shimadzu UV-2550) 进行分析。

1.4 旁热式气敏元件的制备及气敏测试

选用表面敷有叉状金电极, 两端有铂丝电极引出的氧化铝陶瓷管(内径 1.6 mm, 外径 2 mm, 长约 8 mm) 为载体, 如图 1(a) 所示。将实验收集到的产物倒入玛瑙研钵, 加少量无水乙醇研磨至均匀的糊状, 用细毛笔将糊状样品涂敷在陶瓷管外表面。涂覆好的陶瓷管气敏按照旁热式气敏传感器的常规工艺, 焊接在六角塑料底座上, 并将镍铬加热丝插入陶瓷管, 焊接在底座上, 如图 1(b) 。最后将底座安置在老化台(图 1(c)) 上保持老化电压为 4.5 V(300 ℃), 老化时间为一周。老化完成之后进行气敏性能的测试, 气敏性能测试通过静态配气法在气敏测试系统(WS-30A, 郑州炜盛科技) 上完成, 如图 1(d) 。

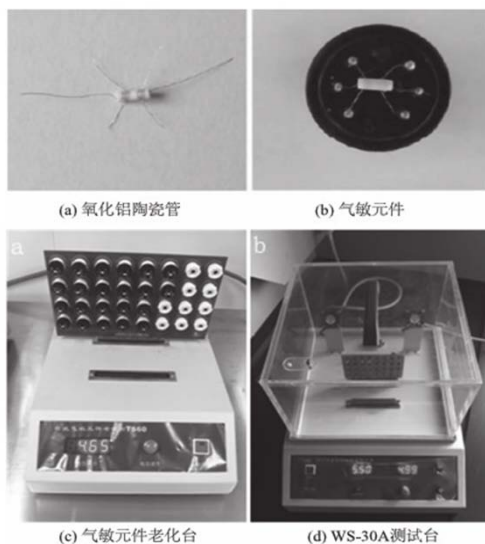


图1 气敏元件的制备及测试仪器

Fig.1 The preparation of gas sensor and gas-testing instrument

定义气敏元件的灵敏度 S 为:

$$S = R_g / R_a. \quad (1)$$

式中: R_g 、 R_a 分别为元件在测试气体中及在空气中的电阻^[6]。

定义气敏元件响应-恢复时间为元件电阻值达到或恢复到之前电压的 90%。气敏测试在 120 ~ 300 ℃ 下进行, 环境中的相对湿度为 50%。

2 分析与讨论

2.1 XRD 测试结果

图 2 为系列铜掺杂氧化锡样品的 XRD 检测结果。从图 2 可以看出, 纯 SnO_2 与氧化铜掺杂 SnO_2 均为四方金红石结构, 与标准卡片 JCPDS41-1445 吻合。当氯化铜掺杂比例(质量分数, 下同) 为 0%、10%、20% 时, 没有发现其他属于铜杂质的峰位。此外, 由于 Sn^{4+} 离子半径为 0.071 nm, Cu^{2+} 离子半径为 0.073 nm, 二者离子半径尺寸比较接近。所以, 在水热反应中, Cu^{2+} 取代了晶格中 Sn^{4+} 的部分位置, 而不足以改变氧化锡的晶格结构^[7], 而这种离子嵌入的形式, 能够使得晶体中缺陷增多, 且反应活性中心增多^[8]。

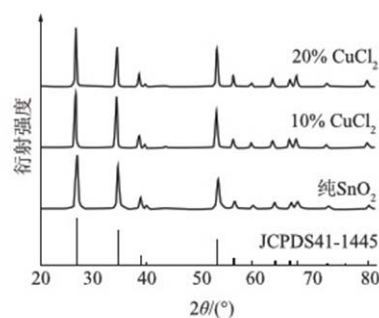


图2 系列氯化铜掺杂氧化锡的 XRD 图

Fig.2 XRD patterns of the Cu-doped SnO_2 nanoparticles

2.2 紫外吸收峰分析

使用双光束紫外分光光度计对纯 SnO_2 纳米晶颗粒与铜掺杂 SnO_2 纳米晶颗粒的紫外吸收光谱进行了测试。如图 3 所示, 氯化铜掺杂比例(质量分数, 下同) 为 0%、10%、20% 的 SnO_2 对应吸收峰分别是 312、338、350 nm。对于纳米晶体系, 每个光吸收带的峰位由蓝移和红移因素共同作用决定, 蓝移因素大于红移因素时会导致光吸收带蓝移, 反之出现红移现象^[7]。从图 3 所示的峰位可以看到, 氯化铜掺杂比例在 20% 的时候, 吸收峰偏移最多, 从 312 nm 偏移到 350 nm。这样的检测结果从侧面证明了随着铜掺杂浓度的升高, Cu^{2+} 取代了晶格中 Sn^{4+} 的位置越多, 导致晶体结构受到的影响越大。

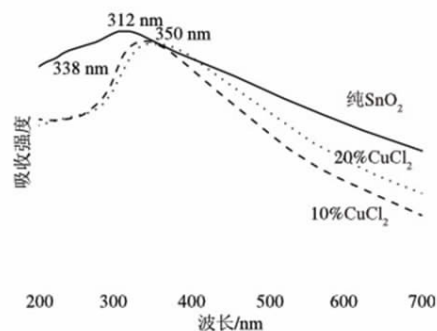


图3 常温下不同比例铜掺杂紫外吸收谱

Fig.3 The room temperature UV spectra of the as-synt

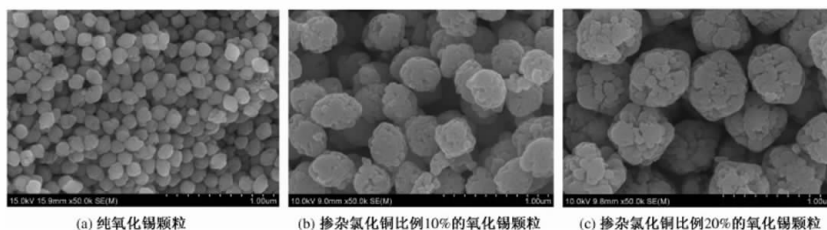


图4 系列铜掺杂氧化锡颗粒 SEM 图像

Fig.4 SEM patterns of the Cu-doped SnO_2 nanoparticles

2.4 气敏性能分析

改变陶瓷管的加热电压即可调节气敏元件工作温度. 图5 为不同铜掺杂比例氧化锡制备的气敏元件在不同工作温度下对体积分数为 10×10^{-6} 的硫化氢气体的灵敏度曲线. 从图5 看出, 气敏元件的灵敏度随温度升高逐渐增加; 随后, 气敏元件的灵敏度随工作温度的上升反而下降, 灵敏度最大的工作温度值即最佳工作温度. 掺杂氯化铜比例 0%、10% 和 20% 对应的最佳响应温度分别是 240、180、210 $^{\circ}\text{C}$, 对应的灵敏度分别是 120.67、318.50、304.44. 综合比较元件的响应温度和灵敏度, 当掺杂氯化铜比例为 10% 时, 所制备的铜掺杂的氧化锡半导体气敏材料的气敏响应特性最佳.

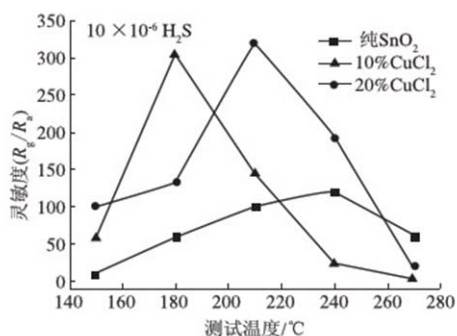
图5 系列铜掺杂氧化锡气敏元件的灵敏度-工作温度曲线(10×10^{-6})Fig.5 Curves of gas response versus and operating temperatures of the Cu-doped SnO_2 nanoparticles

图6 为铜掺杂比例 10% 的氧化锡在 180 $^{\circ}\text{C}$

2.3 形貌分析

图4 为前驱物产物的 SEM 图. 从 SEM 图可以看出, 不同铜掺杂比例的颗粒都是椭圆形, 且铜掺杂浓度增加, 颗粒尺寸变大, 平均粒径从 200 nm 增加到 600 nm. 但随着铜掺杂比例的增加, 氧化锡纳米颗粒的表面可以观察到明显的褶皱状形貌, 这是由于铜掺杂引入增加晶格缺陷, 进而影响纳米颗粒的形貌. 这样的褶皱状表面一定程度上增加纳米颗粒的表面积, 并且铜离子掺杂的越多, 表面缺陷的增多能够为气敏反应提供更多的反应活性位点^[9].

下对体积分数为 10×10^{-6} 的丙酮、甲醛、甲醇、乙醇和硫化氢的响应灵敏度. 由图6 可以看出, 气敏元件对硫化氢气体的灵敏度达 300; 其次是对乙醇气体的灵敏度为 30.3; 对其他几种气体几乎没有响应, 说明铜掺杂的氧化锡半导体气敏元件对硫化氢气体具有良好的选择性和响应性.

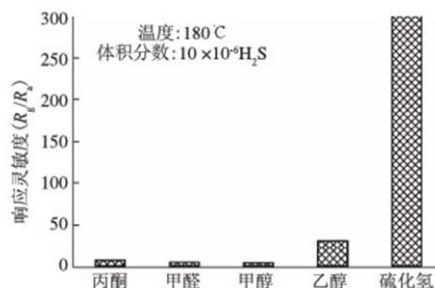


图6 掺杂氯化铜比例 10% 的氧化锡气敏元件对不同气体的灵敏度

Fig.6 Responses of the 10% Cu-doped SnO_2 gas sensor to various gases

图7 为掺杂氯化铜比例为 10% 的氧化锡在 180 $^{\circ}\text{C}$ 下对不同体积分数硫化氢气体的动态响应-恢复曲线. 由图7 可以看出, 气敏元件的响应度随着气体体积分数的增加而增加, 对体积分数为 2×10^{-6} 、 4×10^{-6} 、 6×10^{-6} 、 8×10^{-6} 、 10×10^{-6} 、 15×10^{-6} 的硫化氢气体的灵敏度分别为 17.82、53.14、100.35、180.28、304.4、410.6. 对各个体积分数的气体的响应时间均在 20 s 之内, 恢复时间不超过 50 s. 由此可见, 本实验制备的掺杂氯化铜

比例10%的氧化锡对硫化氢气体具有良好的响应恢复特性。

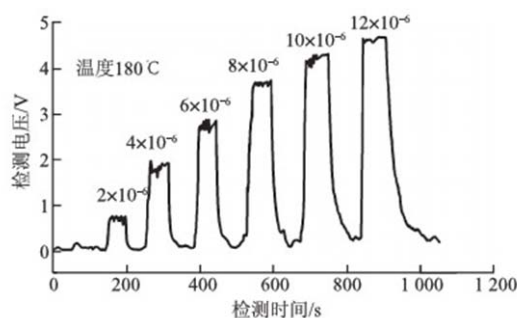


图7 掺杂氯化铜比例10%的氧化锡气敏元件对不同浓度硫化氢气体的响应-恢复曲线

Fig.7 Response and recovery curve of the 10% Cu-doped SnO_2 gas sensor to H_2S

3 结论

铜掺杂能够有效改善纯氧化锡作为气敏元件时气敏响应不高、选择性差和工作温度偏高的缺点。本实验通过研究不同铜掺杂比例对氧化锡气敏性能的增强作用,大大降低工作温度并增大了灵敏度。通过气敏测试结果显示,掺杂氯化铜比例为10%的氧化锡气敏元件对硫化氢具有非常好的选择性和响应性,其工作温度可降低到180℃,对应响应灵敏度为304.4。由此可见,铜掺杂的氧化锡半导体气敏材料是制备高灵敏度和快速响应的硫化氢气敏器件的理想材料,具有较大的实际和商业使用价值。

参考文献:

- [1] 席彩红,高晓平,刘国汉. 二氧化锡气体传感器敏感机理的研究[J]. 曲阜师范大学学报, 2008. 34(2): 66-68.
- [2] 万久晓. 多孔二氧化锡气体传感器的工艺及性能研究[D]. 武汉: 华中科技大学光学与电子信息学院, 2013.
- [3] 唐红岩. 表面改性对纳米 SnO_2 气敏性能影响[D]. 郑州: 郑州大学材料工程学院, 2011.
- [4] 伦宁, 胡春霞, 吴佑实. Cu 掺杂对氧化锡纳米晶结构、形貌及其光学性能的影响[J]. 山东大学学报(工学版), 2003, 33(6): 606-609.
- [5] XIAO Wenzhi, WANG Lingling, MENG Bo, et al. First-principles insight into the surface magnetism of Cu-doped SnO_2 (110) thin film[J]. Rsc advances, 2014, 4(75): 39860-39865.
- [6] 刘洁, 王志敏, 余晓静, 等. 单晶多孔 ZnO 纳米片的制备、表征及气敏性能研究[J]. 无机化学学报, 2012, 28(11): 2329-2334.
- [7] 胡春霞, 吴佑实, 马学军. 掺杂效应对氧化锡纳米晶微结构、形貌及其光学性能的影响[J]. 曲阜师范大学学报, 2004, 30(3): 70-74.
- [8] ZHANG T S, KONG L B, SONG X C, et al. Densification behaviour and sintering mechanisms of Cu-or Co-doped SnO_2 : A comparative study[J]. Acta materialia, 2014, 62: 81-88.
- [9] ZHANG Kaicheng, LIU Yong, LI Yongfeng, et al. Origin of ferromagnetism in Cu-doped SnO_2 : A first-principles study[J]. Journal of applied physics, 2013, 113(5): 053713-5.

Copper - doped Tin Oxide: Fabrication and Gas - sensing Properties

HU Jun¹, GE Meiyang¹, YIN Guilin^{1,2}, YANG Fan², HE Dannong^{1,2}

(1. National Engineering Research Center for Nanotechnology, Shanghai 200241, China; 2. School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: Cu-doped SnO_2 was synthesized via a simple and facile oxalic acid water hydrothermal route by using polyvinylpyrrolidone as surfactant and stannous chloride as well as cupric chloride dissolved in this solution. The structure and morphology of the as-synthesized samples were characterized by XRD, SEM and TEM etc. And the influence of the doping ratio of copper (0 ~ 20%) to gas-sensing properties were analyzed systematically by using a computer-controlled measure system of WS-30A. The gas sensing results indicated that the appropriate proportion of Cu-doping can improve the gas-sensing properties, especially the 10%, in which the response time, recovery time, selectivity and durability of sensors towards to hydrogen sulfide gas improved significantly, and the optimum response temperature decreased dramatically to as low as 120 °C. Finally, the mechanism of the SnO_2 gas-sensing properties enhanced by Cu-doping was discussed.

Key words: hydrothermal method; copper-doped SnO_2 ; hydrogen sulfide; gas-sensing property

文章编号: 1671-6833(2016)03-0052-04

氧化锌一维纳米棒的低温制备及其气敏性能

樊慧庆^{1,2}, 马龙涛^{1,2}, 黄丽梅^{1,2}

(1. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072; 2. 西北工业大学 材料学院, 陕西 西安 710072)

摘 要: 采用低温水热法合成了氧化锌(ZnO)一维纳米棒, 通过X射线衍射(XRD)和扫描电子显微镜(SEM)及高分辨透射电子显微镜(HRTEM)研究了其相结构与形貌, 并测试了基于ZnO一维纳米棒所制作的传感器的气敏性能. 研究表明, 该气体传感器对体积分数为 500×10^{-6} 的乙醇的检测灵敏度为35.71, 对乙醇气体的响应和恢复时间分别约为7 s和9 s, 并具有优良气体选择特性, 最后, 结合电子释放理论解释了其气敏机理.

关键词: 氧化锌; 一维纳米结构; 低温合成; 气敏传感器

中图分类号: O621.25; TB383.1 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.012

0 引言

N型半导体ZnO作为敏感材料主要是基于其良好的电子迁移率、化学稳定性和热稳定性, 并已被用来检测各种各样的气体^[1-4], 例如H₂S、CH₃CH₂OH、CO、O₂、NO₂、NH₃等气体. 然而, 基于零维ZnO的传感器已经不能满足现代社会对传感器的要求, 即快速、连续和微量检测, 同时, 人们一直在努力追求通过简单易行的合成方法, 来控制材料的形貌、生长方向, 因此, 制备形貌各异的ZnO纳米结构引起了越来越多人的关注, 一维ZnO纳米结构具有结构简单, 它还能提供更多的活性表面而在气敏领域具有很大的应用前景^[5-10]. 众多研究组主要探索了通过添加模板、有机物以及表面活性剂的辅助来合成一维ZnO纳米结构, 但是这些有机物会吸附到ZnO的表面, 从而减少ZnO的表面活性面积, 降低气敏性能. 另一方面, 有机物以及表面活性剂往往价格昂贵, 且实验过程通常复杂繁琐, 对设备要求高. 因此, 探索和开发简单易行、环境友好的一维ZnO纳米结构合成技术就显得尤其重要^[11-15].

笔者利用低温水热方法制备出ZnO一维纳米棒, 并系统分析了其对气敏性能的影响规律, 证实一维ZnO纳米结构气体传感器有着优良的气敏性能.

1 试验方案

1.1 材料制备

将2 g醋酸锌(Zn(CH₃COO)₂·2H₂O)、1.2 g六次甲基四胺(HMT)和0.1 g溴化十六烷基三甲铵(CTAB)溶解在35 mL高纯水中, 磁力搅拌20 min, 接着把溶液倒入80 mL的聚四氟乙烯内衬管中密封, 将内衬管放到马弗炉中90℃下保温10 h, 随炉自然冷却至室温, 用去离子水和无水乙醇多次离心洗涤沉淀, 最后在60℃下烘10 h, 获得ZnO纳米棒粉体.

1.2 分析表征

相结构用荷兰菲利普公司的X'pert型X射线衍射仪(X-ray diffraction, XRD)、Cu靶K α 1($\lambda = 0.154\ 06\ \text{nm}$)、测试角度 2θ 从20°~80°来分析. 形貌用日本电子公司的JSM-6701F型扫描电子显微镜(Scanning electron microscope, FE-SEM)观察, 用JEM-3010型高分辨电子显微镜(High resolution transmission electron microscopy, HR-TEM)及选区电子衍射(Selected area electron diffraction, SAED)进行精细结构表征, 采用静态配气法在气敏元件测试系统(HW-30A)上进行气敏性能测试.

收稿日期: 2015-12-09; 修订日期: 2016-01-29

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51172187); 高校博士点基金资助项目(20116102130002)

作者简介: 樊慧庆(1970—), 男, 陕西神木人, 西北工业大学教授, 博士, 博士生导师, 主要从事功能材料研究, E-mail: hqfan@nwpu.edu.cn.

2 分析与讨论

2.1 结构与形貌

图1所示为采用X-射线衍射仪对所获得物质进行相结构表征结果. 可从图1看出, 所获得样品的衍射峰完全对应着六方晶系纤锌矿 ZnO 的峰, 并且峰强度很高, 说明结晶性能好, 同时也没有其它杂峰出现, 其为纯净 ZnO 纳米粉体.

图2(a)、(b)和(c)为所得样品 SEM 照片. 可以看出, 制备所得的 ZnO 粉体由纳米棒组成, 且分散均匀, 纳米棒的长度为 500 nm、直径为 50 nm, 且纳米棒为棱柱状. 图2(d)给出了 ZnO 纳米棒的 HRTEM 照片. 清晰的晶格条纹表明: 所得

ZnO 纳米棒是生长良好的晶体, 其晶格条纹测算出的层间距为 0.52 nm, 与纤锌矿型 ZnO 的 (0001) 晶面间距相吻合.

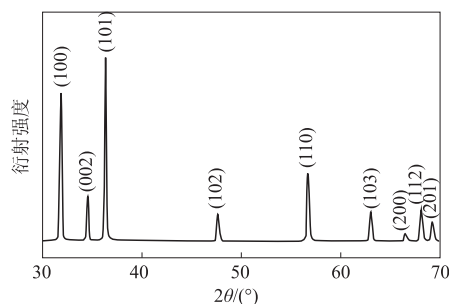


图1 ZnO 纳米棒的 XRD 图谱
Fig.1 XRD patterns of ZnO nanorods

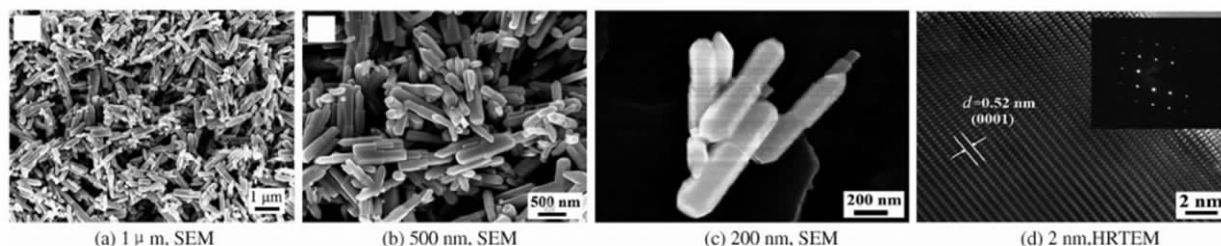


图2 ZnO 纳米棒的 SEM 和 HRTEM 照片
Fig.2 SEM and HRTEM images of ZnO nanorods

2.2 气敏性能

图3所示为 ZnO 纳米棒制作的气敏元件在工作温度为 240 ~ 400 °C, 对体积分数为 300×10^{-6} 乙醇气体的灵敏度. 从图3可以看出, 其对乙醇气体具有较高的检测灵敏度, 当工作温度达 400 °C 时, 气敏元件已具有了良好响应-恢复特性, 因此, 暂定 400 °C 为本研究的工作温度, 后续测试都基于 400 °C 下的测量.

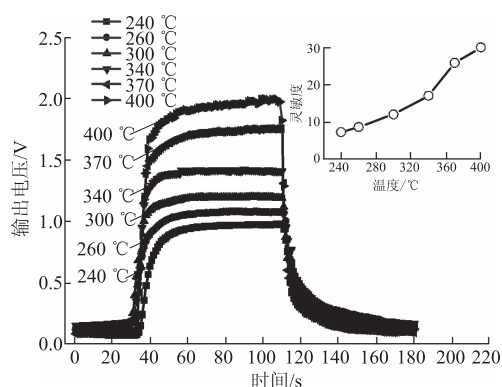


图3 ZnO 纳米棒气体传感器在不同温度下对体积分数为 300×10^{-6} 乙醇气体的响应-恢复特性曲线.
Fig.3 Temperature dependence of the ZnO gas sensor response to 300×10^{-6} ethanol gas.

图4给出了 ZnO 纳米棒传感器在 400 °C 下对不同体积分数乙醇气体的灵敏度曲线. 可以看出, 其对乙醇气体的有效检测范围很宽, 当乙醇体积分数为 50×10^{-6} 时有很好的响应, 灵敏度值可达 7.37. 此外, 元件的灵敏度随着乙醇体积分数

增加而相应地升高, 当乙醇气体的体积分数低于 200×10^{-6} 时, 传感器的灵敏度随着乙醇体积分数的变化基本呈线性变化, 而随着气体体积分数的增加, 传感器的灵敏度变化速率趋于平缓. 当乙醇气体的体积分数达 500×10^{-6} 时, 传感器的灵敏度值为 35.71. 气敏元件对气体的响应-恢复时间也是气敏性能的一个重要性能指标. 从图4可知, 该气敏元件对乙醇气体的响应和恢复时间分别约为 7 s 和 9 s.

考虑到实际应用的需要, 我们还考察了 ZnO 纳米棒气敏元件的选择性, 分别测试了其在 400 °C 下对体积分数为 300×10^{-6} 的不同气体(乙醇、甲醇、丙酮、氨水、甲醛和甲苯)的灵敏度, 结果如图5所示. 由图5可知, ZnO 纳米棒气敏元件对乙醇气体的灵敏度较其他气体高出很多, 其灵敏度值均在其他气体的 3 倍以上. 通过电子释放理论可解释这一现象, 下面式(1)~(3)中以乙醇、甲醛以及氢气的典型反应给出电子释放量的不同.

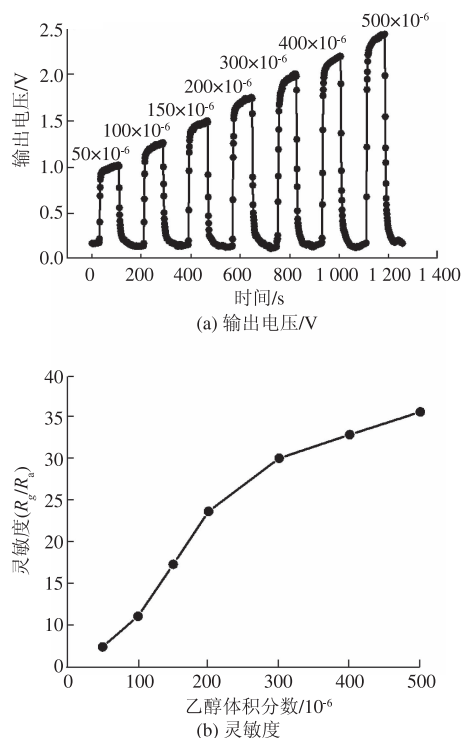
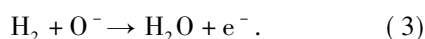
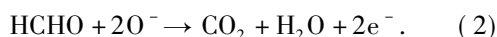
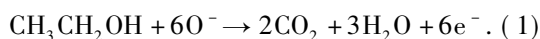


图4 ZnO 纳米棒气体传感器在 400°C 下对不同体积分数乙醇气体检测时的曲线

Fig. 4 Response of the ZnO nanorods sensors exposed to ethanol gas at concentrations ranging from 50×10^{-6} to 500×10^{-6} at 400°C



根据以上方程可以看出,对于同样浓度被测气体来说,乙醇要释放更多的电子,这就是 ZnO 对乙醇敏感的主要原因。

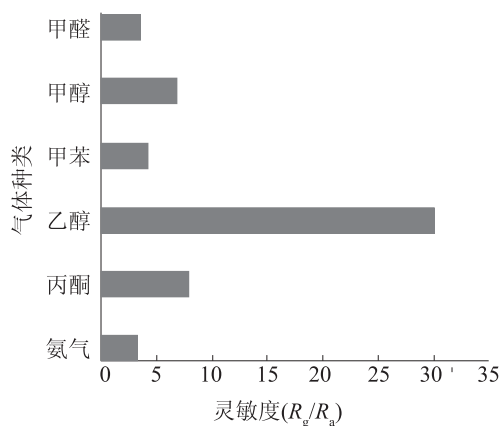


图5 ZnO 纳米棒气体传感器在 400°C 下对体积分数为 300×10^{-6} 的不同气体检测灵敏度

Fig. 5 Selectivity of the ZnO nanorods sensors to different gases with a concentration of 300×10^{-6} at 400°C .

3 结论

采用低温水热法合成了形貌发育完好六方纤锌矿一维 ZnO 纳米棒,基于一维棒状 ZnO 纳米结构的气体传感器 400°C 下对体积分数为 500×10^{-6} 的乙醇的灵敏度为 35.71,有着优良的响应-恢复特性和气体选择特性,通过电子释放理论可解释其气敏机理。

参考文献:

- [1] YAMAZOE N, SAKAI G, SHIMANOE K. Oxide semiconductor gas sensors [J]. Catalysis surveys from asia, 2003, 7(1): 63-75.
- [2] GERIGINTSCHEW Z, FORSTER H, KOSTIZA J, et al. Two-dimensional numerical simulation of semiconductor gas sensors [J]. Sensors and actuators B, 1995 (1/2): 170-173.
- [3] FENG P, XUE X Y, LIU Y G, et al. Achieving fast oxygen response in individual $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ nanowires by ultraviolet illumination [J]. Applied physics letters, 2006, 89(11): 112114(1)-(3).
- [4] HALPERIN W P, Quantum size effects in metal particles [J]. Reviews of modern physics, 1986, 58(3): 533-606.
- [5] LIN G Y, LIANG G, XU H B, et al. Regularly shaped, single-crystalline ZnO nanorods with wurtzite structure [J]. Journal of the american chemical society, 2002, 124(50): 14864-14865.
- [6] ZHANG J, SUN L D, LIAO C S, et al. A simple route towards tubular ZnO [J]. Chemical communications, 2002, 3(3): 262-263.
- [7] SONG N, FAN H, TIAN H. PVP assisted in situ synthesis of functionalized graphene/ZnO (FGZnO) nanohybrids with enhanced gas-sensing property [J]. Journal of materials science, 2015, 50(5): 2229-2238.
- [8] FANG J, FAN H, TIAN H, et al. Surface defects control for ZnO nanorods synthesized by quenching and their anti-recombination in photocatalysis [J]. Applied surface science, 2015, 332: 47-54.
- [9] TIAN H, FAN H, GUO H, et al. Solution-based synthesis of ZnO/carbon nanostructures by chemical coupling for high performance gas sensors [J]. Sensors and actuators B, 2014, 195: 132-139.
- [10] FANG J, FAN H, DONG G. A facile way to synthesize cost-effective ZnO nanorods with enhanced photocatalytic activity [J]. Materials letters, 2014, 120:

- 147 – 150.
- [11] CAI Y, FAN H. One-step self-assembly economical synthesis of hierarchical ZnO nanocrystals and their gas-sensing properties [J]. CrystEngComm, 2013, 15 (44) : 9148 – 9153.
- [12] CAI Y, FAN H. Fast economical synthesis of Fe-doped ZnO hierarchical nanostructures and their high gas-sensing performance [J]. CrystEngComm, 2013, 15(36) : 7339 – 7345.
- [13] CAI Y, FAN H. Rapid photocatalytic activity and honeycomb Ag/ZnO heterostructures via solution combustion synthesis [J]. Colloids and surfaces A: physico-chemical and engineering aspects, 2013, 436: 787 – 795.
- [14] HUANG L, FAN H. Room-temperature solid state synthesis of ZnO/ α -Fe₂O₃ hierarchical nanostructures and their enhanced gas-sensing properties [J]. Sensors and actuators B, 2012, 171/172: 1257 – 1263.
- [15] YAN W, FAN H, ZHAI Y, et al. Low temperature solution-based synthesis of porous flower-like α -Fe₂O₃ superstructures and their excellent gas-sensing properties [J]. Sensors and actuators B, 2011, 160 (1) : 1372 – 1379.

Low – temperature Synthesis and Gas Sensor Properties of One Dimensional ZnO Nanorods

FAN Huiqing^{1,2}, MA Longtao^{1,2}, HUANG Limei^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China; 2. School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: One-dimensional rod-like ZnO nanostructures were synthesized by a low-temperature hydrothermal process. The morphological feature and phase was detected by using x-ray diffraction and scanning electron microscopy. The sensitivity of gas sensors based on the ZnO nanorods can reach 35.71, and cover and recover time can reach up to 7 s and 9 s, respectively, for 500×10^{-6} ethanol. The selectivity of this gas sensor is also very well. In addition, the mechanism of gas sensing was discussed in the theory of electron liberation.

Key words: ZnO; one dimensional nanostructure; low-temperature synthesis; gas-sensing property

文章编号: 1671-6833(2016)03-0056-04

SRC 柱-钢梁混合框架抗震性能研究

楚留声, 崔中敏, 张俊峰, 赵 军

(郑州大学 土木工程学院, 河南 郑州 450001)

摘 要: 对一榀 SRC 框架进行静力非线性分析, 分析结果与试验吻合较好; 在此背景下, 通过对两跨三层的 SRC 柱-钢梁混合框架进行静力非线性分析, 研究了 SRC 柱含钢率和梁柱线刚度比对混合框架抗震性能的影响。结果表明, SRC 柱-钢梁底层框架实现了“强柱弱梁”破坏模式, 混合框架荷载-位移曲线经历了较长的塑性变形阶段, 结构表现出良好的整体延性。随着梁柱线刚度比增加, 框架破坏模式逐渐从整体“强柱弱梁”过渡为“强梁弱柱”破坏模式, 结构延性下降明显, 设计时可取 0.3~0.4 作为参考的界限梁柱线刚度比。

关键词: 混合框架; SRC 柱-钢梁; 抗震性能; 静力非线性分析

中图分类号: TU398 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.013

0 引言

型钢混凝土(Steel Reinforced Concrete, 简称 SRC)柱与钢梁组成的混合框架是目前应用较多的由不同构件混合而成的结构形式之一。SRC 柱中型钢与外包混凝土共同工作, 能够有效发挥钢材和混凝土材料的特性, 经济耐用, 而且能提供足够的刚度, 是地震区常用的柱截面形式之一。同时, 高层结构中框架通常柱距较大, 现实实践中多采用钢梁与 SRC 柱混合来减小结构自重、控制梁跨中裂缝。因此, SRC 柱-钢梁混合框架近年来越来越多地被用于高层框架和混合框架-核心筒混合结构等体系中。

相对于 SRC 柱-钢梁混合框架结构在工程实践中的大量应用, 其整体结构的抗震性能和设计方法的研究则处于起步阶段。现有的研究成果多侧重于构件和节点层次, 对于常见的组合柱、组合梁以及组合节点, 已经积累了大量的试验数据, 同时建立了较为完善的设计理论与方法^[1]。但是由于混合框架体系在地震作用下非线性行为的复杂性, 构件层次上的研究成果不足以充分揭示整体受力特性; 而在体系层次上设计人员更为关心的构件集成和体系优化问题, 其理论研究远远滞后

于实际的工程实践。目前, 尽管《高层建筑混凝土结构技术规程》(JGJ 3—2010)^[2]和《高层建筑钢-混凝土混合结构设计规程》(CECS 230: 2008)^[3]对 SRC 柱-钢梁的构造和设计作出了说明和建议(后者明确将其定义为混合框架), 但其条文主要是结合国内部分工程实践经验偏于安全的状态下确定的, 大部分参考了钢筋混凝土结构或钢结构抗震要求, 缺乏理论基础。

聂建国等^[4]近年对方钢管混凝土柱-组合梁混合框架结构的受力性能进行了分析, 并对其数值模拟方法进行了系列研究^[5], 但以 SRC 柱为主要抗侧力构件的混合框架的抗震性能系统研究则未涉及。徐培福等^[6]对 30 层的钢-混凝土混合结构(框架部分为 SRC 柱-钢梁混合框架形式)模型进行了拟静力试验, 结果为框架部分 SRC 柱出现塑性铰, 而未出现设计预期的“梁铰”破坏形式。笔者前期研究^[7]了混合框架中容易出现的塑性铰分布形式, 并论证了目前抗震规范在内力调整方面存在的不足。

上述研究在一定程度上涉及了混合框架“强柱弱梁”问题的研究, 但对 SRC 柱-钢梁混合框架抗震性能和设计方法的研究尚未系统展开, 对于结构“强柱弱梁”内力调整等关键问题的建议尚

收稿日期: 2015-10-15; 修订日期: 2015-12-20

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51408556, 51478438); 河南省高校科技创新团队项目(15IRTSTHN026), 河南省高等学校重点科研项目(15A560037, 14A560019)

作者简介: 楚留声(1980—), 男, 河南禹州人, 郑州大学副教授, 博士, 主要从事钢-混凝土组合结构研究, E-mail: cls981@163.com.

停留在定性的程度,并未给出明确的调整系数作为参考依据.在此背景下,笔者通过对两跨三层的 SRC 柱-钢梁混合框架进行静力非线性分析,研究了混合框架的破坏状态和抗震能力,并讨论了 SRC 柱含钢率和梁柱线刚度比对其影响.

1 试验及有限元模型参数

本文的 Pushover 分析模型中,钢梁采用 SAP2000 程序提供的基于 FEMA(356) 和 ATC-40 的默认 M3 铰, SRC 柱则采用 CSI 公司有限元通用软件计算得到的 PMM 铰,并结合相关文献[8]确定弯矩-曲率恢复力模型和 $N-M$ 相关曲线,塑性铰均分布在构件两端.按此方法对文献[9]两跨三层 SRC 框架模型对应的原尺寸模型进行了模拟.该框架跨度 6 m,底部层高 4.2 m,二、三层层高 3.6 m,混凝土采用 C35 等级.原模型中 2 mm 厚和 3 mm 厚钢板的屈服强度分别为 264 N/mm² 和 281.7 N/mm²,分析中取其平均值 273 N/mm² 作为型钢的屈服强度.表 1 为模型中 SRC 构件的几何尺寸.

表 1 算例 SRC 框架各构件几何尺寸
Tab.1 member geometry size of SRC frame

构件	截面/mm	型钢/mm	纵筋
SRC 梁	600 × 320	320 × 160 × 16 × 16	4Φ18
钢梁	—	352 × 160 × 16 × 16	—
底层 SRC 柱	480 × 480	288 × 320 × 16 × 24	4Φ18
二、三层 SRC 柱	480 × 480	272 × 240 × 16 × 16	4Φ18

注:表中钢梁尺寸为后面混合框架中钢梁尺寸.

根据配重不足动力模型在弹性及塑性阶段的动力相似关系将 Pushover 分析结果转化,转化后的 Pushover 分析结果和试验值如图 1 所示.

由于 Pushover 分析中假设构件所有的塑性变形都发生在铰内,而且在塑性铰屈服点(面)被触动之前构件变形均为弹性变形,从图中可以看到,

Pushover 分析曲线存在较明显的屈服阶段,而试验曲线相对平缓,但两条曲线在总体趋势上吻合较好,曲线刚进入屈服阶段处试验值与 Pushover 曲线最大相差约 6.2%,由此表明笔者使用的铰属性参数对于 SRC 构件的弹塑性分析是适用的.

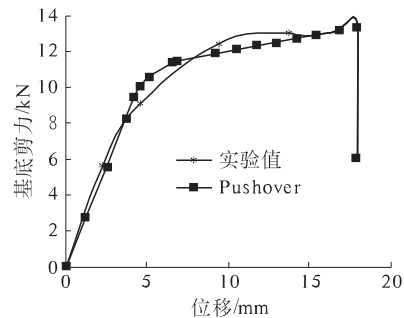


图 1 SRC 框架荷载-位移曲线

Fig.1 Load-displacement curve of SRC frame

2 SRC 柱-钢梁混合框架抗震性能

对两跨三层 SRC 柱-钢梁混合框架进行了 Pushover 分析,分析模型在算例的基础上仅改变钢梁的尺寸(表 1).图 2 给出了该混合框架 Pushover 分析的荷载-位移曲线和构件塑性铰分布,限于篇幅,仅给出主要荷载步塑性铰情况.

从图 2(a) 可以看出,在构件达到屈服荷载之前,曲线呈线弹性上升趋势.位移达到在 140 mm 左右时,曲线出现转折,此时梁端开始出现塑性铰(图 2(b)).此后,随着加载的继续,结构基底剪力值随着加载位移的增大而增加速度明显下降,梁端塑性铰进一步发展,底层和二层柱端开始出现塑性铰,但发展程度较轻.位移值达到 360 mm 时,结构承载力出现下滑趋势,表明结构开始进入塑性破坏阶段,此后塑性铰损伤程度进一步增加,但未出现新的塑性铰.分析结束时底层梁铰发展充分,框架最终以柱端塑性铰的过度发展导致结构破坏.

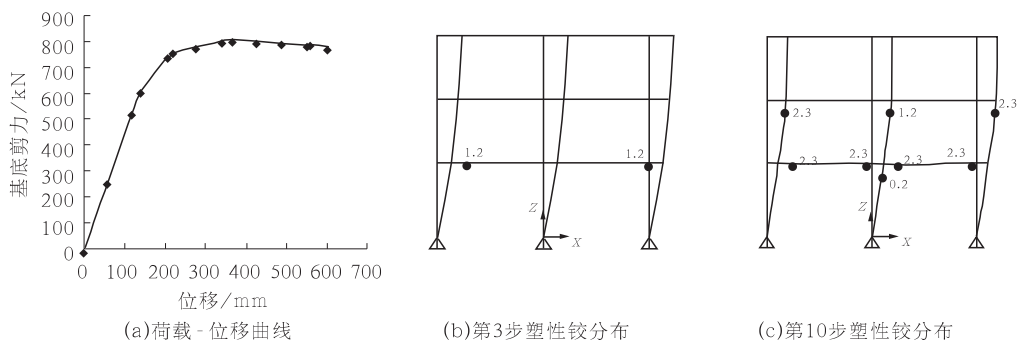


图 2 混合框架荷载-位移曲线和塑性铰分布

Fig.2 Load-displacement curve and plastic hinge development of hybrid frame

由于该框架选用的钢梁三层尺寸均相同,同时二、三层 SRC 柱较小,故算例中二层梁未出现塑性铰,因此框架二层并不符合“强柱弱梁”设计原则。尽管如此,由于剪力最大的底层框架实现了“强柱弱梁”破坏模式,使整个混合框架荷载-位移曲线经历了较长的塑性变形阶段,结构仍表现出较好的整体延性。

3 SRC 柱-钢梁混合框架抗震影响因素

3.1 SRC 柱含钢率

依照《钢筋混凝土结构技术规程》(YB

9082—2006),型钢混凝土构件的最小含钢率为 2%,最大含钢率也不宜超过 15%;同时,型钢混凝土构件中钢板的厚度不能小于 6 mm。基于这些考虑,建立了 3 个含钢率不同的分析模型(含原模型),相应的型钢混凝土柱中型钢截面尺寸如表 2 所示。3 组框架 Pushover 分析的荷载位移-曲线和塑性铰分布如图 3 所示(MODAL0 塑性铰见图 2)。

表 2 SRC 柱含钢率分析模型参数

Tab. 2 Analysis model parameters of the SRC column with different steel ratios

模型	底层型钢尺寸/mm	其他层型钢尺寸/mm	底层型钢率/%	其他层含钢率/%
MODAL0	288 × 320 × 16 × 24	272 × 240 × 16 × 16	8.3	5.0
MODAL1	288 × 320 × 24 × 28	272 × 240 × 18 × 20	10.2	6.0
MODAL2	288 × 320 × 28 × 32	272 × 240 × 20 × 24	11.6	6.9

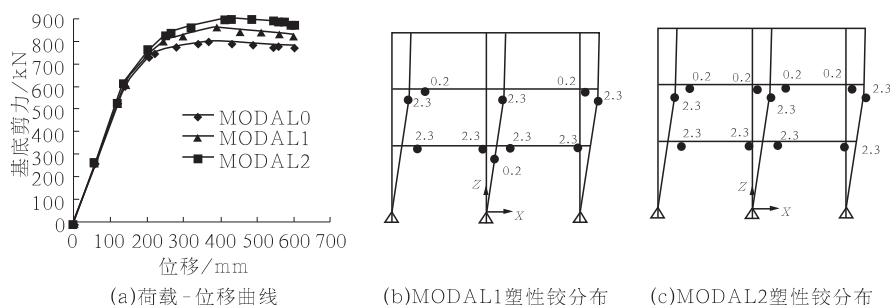


图 3 不同 SRC 柱含钢率的混合框架荷载-位移曲线和塑性铰分布

Fig. 3 Load-displacement curve and plastic hinge development of hybrid frame with different steel ratio in SRC column

由图 3 可知, SRC 柱含钢率在弹性阶段对 SRC 柱-钢梁混合框架的抗侧承载力和变形基本没有影响。进入塑性阶段之后,其变形和延性与基本模型类似,但 SRC 柱含钢率越高明显表现为构件的极限承载力越大。同时,对比 3 个模型塑性铰发展状况可以发现, MODAL1 二层每道梁一侧均出现了塑性铰,而 SRC 柱含钢率更大的 MODAL3 二层梁不仅两端均出现了塑性铰,并且推覆结束时塑性铰的发展程度也更高。

可见, SRC 柱含钢率在在一定程度上影响了混合框架的破坏模式,通常 SRC 柱含钢率越高, SRC 柱-钢梁混合框架的塑性铰发展得越充分,结构的变形能力和耗能能力越强。

3.2 梁柱线刚度比

相比含钢率对破坏模式的影响,梁柱线刚度比 i_b/i_c 是混合框架设计时更常用的指标。为此,在基本模型的基础上通过改变钢梁几何尺寸来调整框架的刚度比 i_b/i_c ,如表 3 所示,并以此来考察梁柱线刚度比对结构破坏模式及承载能力的影响。

图 4 给出了各组模型的荷载-位移曲线,同时

由于篇幅关系仅给出了 MODAL0、MODAL5 和 MODAL6 推覆结束时的塑性铰分布。

表 3 不同梁柱线刚度比模型参数

Tab. 3 Analysis model parameters with different linear stiffness ratios of beam to column

模型	钢梁几何尺寸/mm	i_b/i_c	
		底层	其他层
0	280 × 140 × 12 × 16	0.077	0.080
1	300 × 160 × 12 × 16	0.102	0.105
2	352 × 160 × 16 × 16	0.156	0.161
3	400 × 160 × 16 × 16	0.212	0.218
4	400 × 180 × 16 × 18	0.249	0.257
5	400 × 200 × 16 × 20	0.291	0.300
6	400 × 300 × 16 × 20	0.411	0.424
7	500 × 300 × 16 × 24	0.779	0.803

注:表中 MODAL2 代表前文分析中的基本模型。

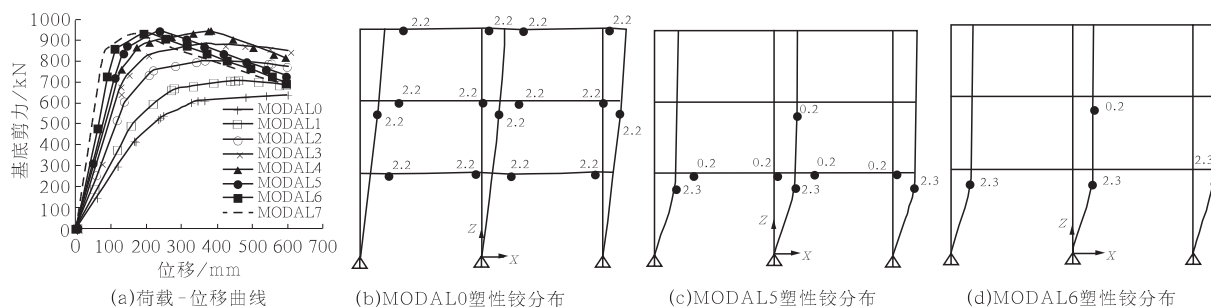


图4 不同梁柱线刚度比的混合框架荷载-位移曲线和塑性铰分布

Fig. 4 load-displacement curve and plastic hinge development of hybrid frame with different linear stiffness ratio of beam to column

从图4可以看出,在梁柱线刚度比较小时,混合框架的荷载-位移曲线比较饱满,结构屈服后均有较长的屈服阶段,表现出较好的延性.底部两层均出现梁铰机制,推覆结束时梁端塑性铰发展比较充分,算例中 MODAL0 和 MODAL1 均呈现该破坏状态.随着梁截面增大,框架的承载力逐渐增加,尽管破坏时塑性铰发展程度不同,但混合框架整体延性并未较 MODAL0 和 MODAL1 出现明显的下降,框架的破坏模式逐渐呈现前述算例中的破坏状态,即仅底层梁铰机制,MODAL2 ~ MODAL5 均呈现此破坏形式.梁柱线刚度比继续增加,从 MODAL6 开始,混合框架底层也从梁铰机制转变为柱铰机制(图4(d)).对应图4(a)中,框架的承载力与 MODAL5 非常接近,但框架承载力达到最大之后下降趋势非常明显,框架的延性较之前的几个模型下降很快,结构整体上呈现“强梁弱柱”破坏模式.综合本文算例,结构破坏模式本质上的变化发生在梁柱线刚度比为 0.291 ~ 0.411 之间,设计时可取值 0.3 ~ 0.4 作为参考的界限梁柱线刚度比.

4 结论

(1) 对两跨三层 SRC 柱-钢梁混合框架 Push-over 分析结果表明,底层框架实现了“强柱弱梁”破坏模式,混合框架荷载-位移曲线经历了较长的塑性变形阶段,结构表现出良好的整体延性.

(2) SRC 柱含钢率在一定程度上影响混合框架的破坏模式,通常 SRC 柱含钢率越高, SRC 柱-钢梁混合框架的塑性铰发展得越充分,结构的变形能力和耗能能力越强.

(3) 梁柱线刚度比较小时,本文算例中混合框架底部两层均实现了“强柱弱梁”破坏模式,结

构整体延性较好.随着梁柱线刚度比增加,框架破坏模式逐渐过渡为整体“强梁弱柱”破坏模式,结构延性下降明显.结构破坏模式本质上的变化发生在梁柱线刚度比为 0.291 ~ 0.411 之间,设计时可取值 0.3 ~ 0.4 作为参考的界限梁柱线刚度比.

参考文献:

- [1] 聂建国. 高性能结构体系 [C] // 科学发展战略基金委员会—中国科学院 2011—2020 学科发展战略研究专题报告集: 建筑、环境与土木工程. 北京: 中国建筑工业出版社, 2011.
- [2] JGJ 3—2010. 高层建筑混凝土结构技术规程 [S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2010.
- [3] CECS 230: 2008. 高层建筑钢-混凝土混合结构设计规程 [S]. 北京: 中国计划出版社, 2008.
- [4] 聂建国, 黄远. 考虑楼板组合作用的方钢管混凝土组合框架受力性能试验研究 [J]. 建筑结构学报, 2011, 32(3): 99—108.
- [5] 陶慕轩, 聂建国. 面向体系非线性分析的钢管混凝土柱-组合梁节点多尺度高效数值模型 [J]. 土木工程学报, 2014, 47(9): 57—69.
- [6] 徐培福, 薛彦涛, 肖从真, 等. 带转换层型钢混凝土框架-核心筒结构模型拟静力试验对抗震设计的启示 [J]. 土木工程学报, 2005, 38(9): 1—8.
- [7] 楚留声, 高丹盈, 赵更岐. SRC 柱-钢梁组合框架“强柱弱梁”破坏机制研究 [J]. 郑州大学学报(工学版), 2009, 30(4): 26—29.
- [8] 楚留声, 白国良. 型钢混凝土框架 pushover 分析 [J]. 地震工程与工程振动, 2009, 29(2): 51—56.
- [9] 薛建阳, 赵鸿铁. 型钢混凝土框架模型的弹塑性地震反应分析 [J]. 建筑结构学报, 2000, 21(4): 28—33.

(下转第 63 页)

基于通行效率最优的交叉口控制方式优选

沈家军, 王 群

(扬州大学 建筑科学与工程学院, 江苏 扬州 225127)

摘 要: 为了实现交叉口时空资源的最佳利用, 以流量、速度及延误3个参数建立了交叉口交通流的通行效率模型, 在此基础上考虑到多冲突点情形构建了整个交叉口通行效率模型, 并以普遍采用的无控制、两相位、三相位及四相位4种控制方式为对象, 提出了4种控制方式下交叉口通行效率的计算方法, 同时, 基于具体数据求解了不同流量条件和不同控制方式下交叉口的通行效率数值. 结果表明: 当每个进口道流量小于100 veh/h时, 无控制方式的通行效率最大; 当流量位于100~400 veh/h时, 两相位控制的通行效率最大; 当流量大于400 veh/h时, 四相位控制的通行效率最大.

关键词: 交通工程; 交叉口; 通行效率; 控制方式

中图分类号: U491.2 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.014

0 引言

交叉口是城市道路网络的节点, 同时也是道路交通的瓶颈所在. 由于交叉口交通流的多样性以及时空资源的有限性, 使得不同类型不同方向的交通流之间存在较大的竞争性, 如何科学合理地分配这些资源, 其本质就是个目标优化的问题, 而采用不同的优化目标将会生成不同的控制策略和控制方式. 目前, 就交叉口优化目标而言, 近期的研究成果主要包括: 以延误控制为优化目标^[1]、以通行能力为优化目标^[2]、以公交优先为优化目标^[3]、以环境效益为优化目标^[4]以及若干目标的综合优化^[5-6]. 鉴于交叉口是一个时间-空间二维系统, 笔者前期基于时空资源利用建立了交叉口通行效率模型^[7], 并以通行效率为指标研究了两相位与四相位的临界流量^[8].

在此基础上, 笔者拟从交叉口多冲突点角度, 建立无控制、两相位、三相位及四相位这4种常见控制方式下交叉口通行效率模型, 研究交叉口不同控制方式下的优选方法, 从而为交叉口的控制与管理提供理论支撑与决策支持.

1 交叉口通行效率模型

1.1 单冲突点通行效率模型

德国学者 Werner Brilon 将交通流的通行效率表示为^[9]

$$E_t = Qv. \quad (1)$$

式中: E_t 代表交通流通行效率, veh·km/h; Q 代表单位时间内交通流流量, veh; v 代表交通流平均通行速度, km/h. 该模型表明, 在单位时间内越多的车辆以越快的速度运行则其通行效率越高.

对于交叉口而言, 交通冲突可能会在较大程度上影响交通流的通行速度, 故需将交通冲突因素在模型中反映出来, 笔者在前期研究中建立了考虑交通冲突的交叉口通行效率模型, 如式(2)所示:

$$E_t = Q \cdot v = Q \cdot S/t =$$

$$Q \cdot S/(t_0 + d) = (Q \cdot v)/(1 + d/t_0). \quad (2)$$

式中: S 为交通流行驶轨迹长度; t 为交通流在交叉口的通行时间; t_0 、 v_0 分别为交通流在未发生交通冲突情形下的通行时间和通行速度; d 为交通冲突产生的延误, 若无交通冲突发生, $t = t_0$, 否则 $t = t_0 + d$.

1.2 多冲突点通行效率模型

以上研究是针对单个冲突点而言的, 即单股交通流只与另外一股交通流发生冲突的情形, 而实际情况下可能存在单股交通流与多股交通流均发生冲突的情况, 此时需将单冲突情形拓展为多冲突情形, 如图1所示.

收稿日期: 2015-10-17; 修订日期: 2015-12-16

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51208451); 2014年度江苏省“青蓝工程”项目; 扬州市重点研发计划(社会发展)项目(YZ2015083)

作者简介: 沈家军(1979—), 男, 江苏扬州人, 扬州大学副教授, 博士, 主要从事交通工程研究, E-mail: jjshen@yzu.edu.cn.

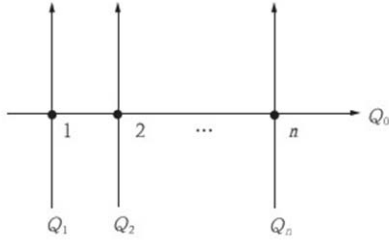


图1 多冲突点情形示意图

Fig. 1 Diagram of multi-traffic conflict points

假设第0股交通流同时与 n 股交通流发生冲突,冲突点分别用 $1, 2, \dots, n$ 表示. 由于第 i 个冲突点的存在使得第0股交通流穿越交叉口的时间为 t_{0i} ,则

$$d_{0i} = t_{0i} - t_{00}.$$

因此,第0股交通流的通行效率为

$$E_{00} = \frac{v_{00} \cdot Q_0}{\left(\sum_{i=1}^n d_{0i} / t_{00} \right) + 1}. \quad (3)$$

假设交叉口有 m 股交通流,则交叉口通行效率为

$$E = \sum_{i=1}^m E_{i0} = \sum_{i=1}^m \frac{v_{0i} \cdot Q_i}{\left(\sum_{j=1}^n d_{0j} / t_{0j} \right) + 1}. \quad (4)$$

2 不同控制方式下交叉口通行效率

2.1 无控制方式

对于无控制交叉口而言,直行与直行、直行与左转均存在交通冲突,根据公式(4),此时交叉口通行效率为

$$E = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^m \frac{Q_{i0j} Q_{ij}}{\sum_{k=1}^n (d_{i0k} / t_{i0k}) + \sum_{l=1}^o (d_{i0l} / t_{i0l}) + 1}. \quad (5)$$

式中: E_{i1} 、 E_{i2} 分别代表直行车和左转车通行效率; m 代表交通流数目; n 、 o 代表该交通流分别与直行车以及左转车的冲突点数目.

2.2 两相位控制方式

对于一般的两相位交叉口而言,对向交通流同时放行,相邻交通流分别放行,此时不存在直行与直行以及左转与左转之间的交通冲突,根据公式(4),此时交叉口通行效率为

$$E = \sum_{l=1}^2 \sum_{i=1}^2 g_l E_{lil} / T = \sum_{l=1}^2 \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^m g_l \frac{Q_{i0l} Q_{ij}}{\sum_{k=1}^n (d_{i0k} / t_{i0k}) + 1}. \quad (6)$$

式中: g_l 代表相位的绿灯时间; T 代表周期长度,其他符号如上所示.

2.3 四相位控制方式

四相位交叉口直行车流与左转车流分开放行,不存在直行车与左转车之间的交通冲突,根据公式(4),此时交叉口通行效率为

$$E = \sum_{l=1}^4 \sum_{i=1}^2 g_l E_{lil} / T = \sum_{l=1}^4 \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^m g_l v_{i0j} Q_{ij} / T. \quad (7)$$

其中所有符号如上所示.

2.4 三相位控制方式

对于三相位交叉口而言,一个方向采用单相位控制,另一方向采用两相位控制,此时交叉口通行效率为

$$E = \sum_{l=1}^2 \sum_{i=1}^2 g_l E_{lil} / T = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 g_1 \frac{v_{i0j} Q_{ij}}{\sum_{k=1}^n (d_{i0k} / t_{i0k}) + 1} + \sum_{l=2}^3 \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^m g_l v_{i0j} Q_{ij} / T. \quad (8)$$

式中: g_1 、 g_2 和 g_3 分别代表单相位的绿灯时间和两相位的直行与绿灯时间;其他符号如上所示.

3 算例应用

为了确定交叉口在不同流量条件下的最佳控制方式,以宁海路—汉口西路十字型交叉口为例,南北向直行车辆平均行驶时间分别用 t_{c1} 和 t_{c2} 表示;南北向左转车辆平均行驶时间分别用 t_{c3} 和 t_{c4} 表示. 所有数据均以周期为单位进行统计,通过视频数据可以确定所有直行及左转车辆驶入和驶出交叉口的时刻,计算时刻差则可以得到每辆车在交叉口内的行驶时间,从而可以求得每个周期所有车辆的平均行驶时间,而直行车和左转车的流量可通过计数获取. 采集的数据显示: 车辆平均行驶时间 t_{ci} 不仅与该股交通流本身的流量相关,同时也与其冲突交通流的流量相关,可表达为 $t_{ci} = g_i(Q_{i1}, Q_{i2})$. 将所有实际采集到的数据进行统计分析发现: 南北进口直行车在与对向左转车发生交通冲突情况下的行驶时间分别为

$$t_{c1} = 0.125Q_1 + 1.097Q_2 + 1.133;$$

$$t_{c2} = 0.124Q_1 + 0.388Q_2 + 1.733.$$

南北进口左转车在与对向直行车发生交通冲突情况下的行驶时间分别为

$$t_{c3} = 0.266Q_1 + 1.756Q_2 + 0.269.$$

$$t_{c4} = 1.713Q_1 + 1.526Q_2 + 0.275.$$

式中: Q_1 和 Q_2 分别表示进口交通流流量和对向冲

突交通流流量.

另外,通过视频采集直行与左转未发生交通冲突的情形,此时直行车和左转车的平均行驶时间 t_{0t} 和 t_{0l} 分别为 2.22 s 和 4.84 s,直行车与左转车的行驶时间仅与该股交通流自身的流量有关.通过视频采集的数据进行统计发现:直行车和左转车在无交通冲突情况下的行驶特性分别为

$$v_{0t} = -0.334Q_t + 13.284;$$

$$v_{0l} = -0.456Q_l + 11.132.$$

经过统计得到左转车流量平均比例为 20%.通过公式(5)~(8)可以计算出在每个进口道不同流量和不同控制方式下的交叉口通行效率,如表 1 所示.

表 1 不同控制方式下交叉口通行效率

Tab.1 Efficiency of intersection under different control modes

序号	流量 $Q/$ (veh · h ⁻¹)	通行效率 $E/(veh · km · h^{-1})$			
		无控制	两相位	三相位	四相位
1	100	100	85	63	50
2	200	91	142	91	97
3	300	90	182	110	141
4	400	68	191	114	181
5	500	60	198	117	218
6	600	55	202	118	251
7	700	51	203	118	281
8	800	48	202	117	307
9	900	45	199	115	330
10	1 000	42	195	112	350
11	1 100	40	190	109	366
12	1 200	38	183	105	379
13	1 300	36	176	101	388
14	1 400	33	169	96	394
15	1 500	31	160	91	396
16	1 600	29	152	86	395

将表 1 的数据描绘于图中,得到不同控制方式下交叉口通行分布效率如图 2 所示.从图 2 可以看出,在同一流量的条件下不同控制方式的通行效率均存在一定的差异.当每个进口道流量较低时(小于 100 veh/h),无控制方式的通行效率最大;随着流量进一步增大(100~400 veh/h),两相位控制的通行效率最大;当流量增大到一定程度时(大于 400 veh/h),四相位控制的通行效率变为最大.图 2 显示的规律符合交叉口交通流运行的基本特性,当流量较低时车辆可以合理地利用间隙穿越,此时车辆之间的交通冲突较少,所以无控制方式通行效率最大.随着流量的加大,交通冲

突越发频繁,此时应将不同进口以及不同方向的车辆分离,因此宜采用相位控制的方式,流量越大,相位数宜越多.

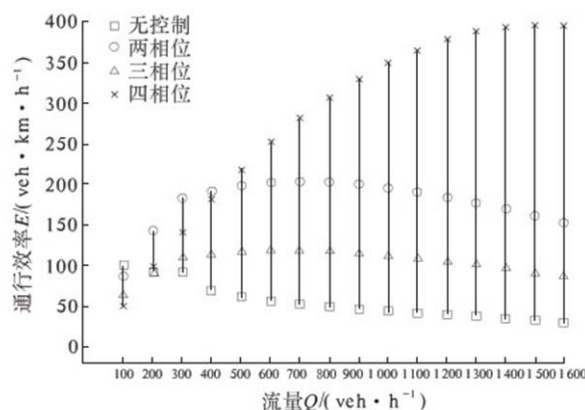


图 2 不同控制方式下交叉口通行效率分布图

Fig.2 Distribution graph of efficiency of intersection under different control modes

4 结束语

流量、运行速度与延误是构成交叉口通行效率的 3 个重要参数,这些参数全面反映了交叉口时空资源的利用程度,因此,通行效率的优化是实现其时空资源最佳利用的途径.笔者以目前普遍采用的四种控制方式为对象,研究了交叉口在不同流量条件下通行效率的变化趋势及规律,从而能够为交叉口的控制管理提供理论指导.

参考文献:

- [1] 张惠玲,王益,尹宝计,等. 基于实时延误的交叉口控制方案优化分析[J]. 广西大学学报(自然科学版), 2015,40(1): 149-154.
- [2] CHANG Yulin, CUI Yibo, ZHANG Peng. Multi-phase signal setting and capacity of signalized intersection [J]. Journal of southeast university (english edition), 2009, 25(1): 123-127.
- [3] 马万经,吴明敏,韩宝新,等. 考虑可变速度调节的单点交叉口公交信号优先控制方法[J]. 中国公路学报, 2013,26(2): 127-133.
- [4] 刘永红,廖瀚博,余志,等. 基于环境影响的交叉口控制方式综合评估研究[J]. 中山大学学报(自然科学版), 2013,52(1): 12-16.
- [5] 肖婧,王科俊,毕晓君. 交叉口混合交通流高维多目标信号优化控制[J]. 公路交通科技, 2014,31(11): 108-115.
- [6] 龙琼,胡列格,张谨帆,等. 考虑交通管理策略的交叉口信号控制多目标优化[J]. 中南大学学报(自

- 然科学版), 2014, 45(7): 2503 – 2508.
- [7] SHEN Jiajun, TIAN Zhongzong, WANG Wei. Correlation between degree of complexity and efficiency for intersections in China [J]. Journal of transportation engineering, 139(2): 193 – 199.
- [8] 沈家军, 王伟. 基于交叉口通行效率的两相位与四相位控制方式临界流量研究 [J]. 交通运输系统工程与信息, 2014, 14(4): 53 – 58.
- [9] 沈家军, 王伟. 道路交叉口通行效率与冲突强度模型研究 [J]. 公路交通科技, 2010, 27(8): 91 – 95.

Control Modes of Intersection Based on Efficiency Optimization

SHEN Jiajun, WANG Qun

(College of Civil Science and Engineering, Yangzhou University, Yangzhou 225009, China)

Abstract: In order to achieve optimum utilization of time-space resources at intersections, volume, speed and delay were selected as three parameters to develop an efficiency model for traffic flow. In addition, the efficiency model for intersection was constructed based on multi-traffic conflict points. Four efficiency-oriented models for four popular control modes including uncontrolled intersection mode, two-phase mode, three-phase mode and four-phase mode were proposed, and the efficiency values were calculated according to the field volumes and control modes. The results indicate that the condition for an intersection under un-controlled mode, two phases mode and four phases mode to reach its optimal efficiency is that the maximum volume is smaller than 100 vehicles, between 100 and 400 vehicles, and bigger than 400 vehicles, per hour per approach, respectively.

Key words: traffic engineering; intersection; efficiency; control mode

(上接第 59 页)

Study on the Seismic Performance of SRC Column – Steel Beam Hybrid Frame Structure

CHU Liusheng, CUI Zhongmin, ZHANG Junfeng, ZHAO Jun

(School of Civil Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: In this paper, a static nonlinear analysis of SRC frame has been made, and the analytical results agree well with those of the tests. In the same parameter settings, the static nonlinear analysis of a 2-span, 3-story SRC column-steel beam hybrid frame is then carried out to learn its seismic performance when the steel ratio of SRC column and linear stiffness ratio of beam to column is different. The results show that the bottom story of SRC column-steel beam hybrid frame achieve the strong column-weak beam failure mode, so the overall structure experienced a long plastic deformation stage and exhibited good ductility. With the increase of the linear stiffness ratio of beam to column, the failure of hybrid frame gradually turned from the overall “strong column-weak beam” mode into “strong beam-weak column” mode, and the structure ductility reduced significantly. According to the calculation results, a reference value range 0.3 ~ 0.4 is suggested for line stiffness ratio of beam to column in SRC column-steel beam hybrid frame design.

Key words: hybrid frame; SRC column-steel beam; seismic performance; static nonlinear analysis

基于地基系数法的横向受荷桩通解研究

贺拴海, 贺小卫

(长安大学 公路学院, 陕西 西安 710064)

摘要: 为完善和改进基于地基系数法的桩身内力计算通解, 以文克尔假定和幂级数法为理论基础, 推导了考虑桩身计算宽度非线性的通解以及通过简化得到计算宽度线性的通解, 并给出相应的通解表达式, 从而将目前基于地基系数法的桩身内力计算理论进行发展和统一. 通过对其初值条件进行研究总结, 得出目前常用的4种桩顶边界和5种桩端边界条件, 进而给出其相应的计算表达式, 从而解决了横向受荷桩的计算问题.

关键词: 地基系数法; 横向受荷桩; 通解; 地基比例系数; 边界条件

中图分类号: TU753

文献标志码: A

doi: 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.015

0 引言

竖桩由于自身在施工和受力方面的突出优势, 作为结构物的桩基础已是大势所趋, 故从上世纪五十年代开始, 学术界开展了大量的研究, 尤其是在地基系数法方面. 地基系数法采用捷克学者文克尔(E. Winkler)于1867年提出的弹性地基梁为理论依据. 该假定认为地基为服从虎克定律的弹性体, 且地基反力 R_y 与桩侧上的任意一点的横向位移 x_y 成正比. 地基反力的一般表达式为 $R_y = k(y)x_y$; 地基系数 $k(y) = m(y_0 + y)^n$, 而对于地基系数的表达式的选取不同, 又产生了很多方法, 比如我们所熟知的张有龄法、 m 法和 C 法等一系列计算方法. 常保平^[1]对多年冻土地区的桩进行分析, 得出了地基系数为 $k(y) = m y^2$ 时更加合理; 黄杰等^[2]提出考虑计算宽度非线性模型及其解; 为了给出比较统一的表达式, 范文田^[3]用幂级数法推导出侧向梯形荷载受力桩的通解, 其后张耀年^[4-5]根据这个通解进行了初值问题分析, 并得出进一步的通解; 王伯惠等^[6-9]用麦克-劳林级数法推导出受横向荷载桩的通解并对该通解进行了详细的分析研究. 然而, 目前还没有通解公式考虑计算宽度非线性、承受水平荷载及地面(局部冲刷线)地基比例系数不为零的因素, 故笔者考虑上述因素进而推导出更加完备的通解, 并对该通解简化进而得出更加简单实用的通解表达

式, 除此之外, 也对初值条件进行了总结.

1 横向受荷桩的通解

如图1所示, 桩顶与地面或局部冲刷线平齐. 对各个量的符号规定为: 横向位移 x_y 顺 x 轴正方向为正值; 转角 φ_y 逆时针方向为正值; 弯矩 M_y 当左侧纤维受拉时为正值; 横向力 Q_y 顺 x 轴正方向为正值, 下文推导过程中将会省略小脚标.

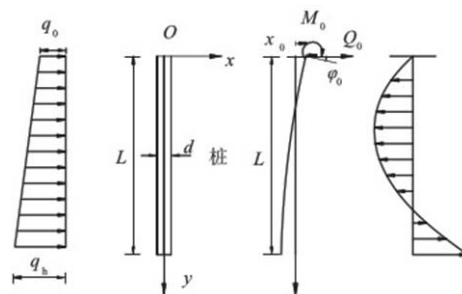


图1 横向受荷桩的计算简图

Fig. 1 Laterally loaded piles calculation diagram

故如图2所示, 图(a)即为现阶段普遍使用的计算宽度形式, 即假定计算宽度随桩身为常数; 图(b)是由黄杰等^[10-11]提出的非线性分布假定形式, 即假定计算宽度随桩身为抛物线变化, 该种形式考虑了计算宽度随桩身的变化, 实质上是考虑了桩土共同作用的影响随桩身变化, 更加科学合理, 笔者将会以上述两种形式分别导出桩身内力计算通解.

收稿日期: 2015-09-29; 修订日期: 2015-12-16

基金项目: 国家科技支撑计划项目(2014BAG05B00)

作者简介: 贺拴海(1962—), 男, 陕西洛川人, 长安大学教授, 博士生导师, 主要从事桥梁结构方面的研究, E-mail: 1943811337@qq.com.

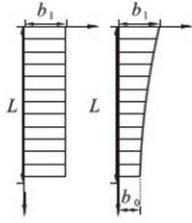


图2 计算宽度沿桩身分布图

Fig.2 Calculate the width of the pile body

1.1 考虑计算宽度非线性的通解

根据材料力学原理,弹性柱的弹性挠曲线微分方程为:

$$EI \frac{d^4 x}{dy^4} + P_y \frac{d^2 x}{dy^2} + mb_1 (y_0 + y)^n x = q_0 B + n_0 B y. \quad (1)$$

式中: EI 为桩身抗弯刚度; m 为地基系数的比例系数; b_1 为桩的计算宽度; y_0 为初始横向位移系数,即桩顶与粘结力有关的系数(考虑到地基土壤千变万化,一些土或岩石在地表处也具有一定的抗力,故加入该项); q_0 为桩顶均布力集度; q_h 为桩端均布力集度; n_0 为外荷载沿桩身的斜率, $n_0 = (q_h - q_0)/L$; L 为桩身入土深度; B 为桩身实际宽度。

式中, P_y 为桩的轴向荷载。由于 P_y 的作用影响很小,且该项使得上列微分方程求解复杂化,因此,通常可将 $P_y (d^2 x/dy^2)$ 项略去不考虑,即得如下公式:

$$EI \frac{d^4 x}{dy^4} + mb_1 (y_0 + y)^n x = q_0 B + n_0 B y. \quad (2)$$

黄杰等^[10-11]提出:

$$x_{b_1} = (b_0 - b_1)/L^2 y^2 + b_1. \quad (3)$$

为使得该式更具有普遍性,本文假设

$$x_{b_1} = ay^2 + by + c. \quad (4)$$

式中: a, b, c 可根据实际情况选用,式(3)即为该式(4)的一个特例。将式(4)代入式(2)可得如下公式:

$$EI \frac{d^4 x}{dy^4} + m(ay^2 + by + c)(y_0 + y)^n x = q_0 B + n_0 B y. \quad (5)$$

令 $y' = y_0 + y$, 因为 $dy' = d(y_0 + y) = dy$, 故 $dy^4 = d y'^4$, 则得如下公式:

$$EI \frac{d^4 x}{dy'^4} + m(ay'^2 - (2ay_0 - b)by' + (ay_0^2 - by_0 + c))y'^n x = (q_0 B - n_0 B y_0) + n_0 B y'. \quad (6)$$

将系数表示如下:

$$\begin{cases} \alpha_1 = ma/(EI); \\ \alpha_2 = -m(2ay_0 - b)/(EI); \\ \alpha_3 = m(ay_0^2 - by_0 + c)/(EI); \\ \beta_1 = (q_0 B - n_0 B y_0)/(EI); \\ \beta_2 = n_0 B/(EI). \end{cases} \quad (7)$$

将式(7)代入式(6)可得如下公式:

$$\frac{d^4 x}{dy'^4} = -(\alpha_1 y'^{n+2} + \alpha_2 y'^{n+1} + \alpha_3 y'^n) x + \beta_1 + \beta_2 y'. \quad (8)$$

利用高等数学的幂级数展开方法求解上述四阶微分方程。设

$$x_{(y)} = \sum_{i=0}^{\infty} a_i y'^i = a_0 y'^0 + \cdots + a_k y'^k + \cdots \quad (9)$$

对上式连续求4次导数,得

$$\frac{d^4 x}{dy'^4} = \sum_{i=4}^{\infty} i(i-1)(i-2)(i-3) a_i y'^{i-4}. \quad (10)$$

式(8)右式 = 式(10)右式,得

$$\begin{aligned} \sum_{i=4}^{\infty} i(i-1)(i-2)(i-3) a_i y'^{i-4} &= \beta_1 + \beta_2 y' - \\ \alpha_1 \sum_{i=0}^n (a_i y'^{i+n+2}) - \alpha_2 \sum_{i=0}^n (a_i y'^{i+n+1}) - \alpha_3 \sum_{i=0}^n (a_i y'^{i+n}). \end{aligned} \quad (11)$$

令左端 $l = i - 4$, 则得

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{\infty} (i+1)(i+2)(i+3)(i+4) a_{i+4} y'^i &\equiv \beta_1 + \beta_2 y' - \\ \alpha_1 \sum_{i=0}^n (a_i y'^{i+n+2}) - \alpha_2 \sum_{i=0}^n (a_i y'^{i+n+1}) - \alpha_3 \sum_{i=0}^n (a_i y'^{i+n}). \end{aligned} \quad (12)$$

式中: n 取整数,又由于式(12)为一恒等式,故同次幂的系数是相等的,故可得

$$\begin{aligned} i=0 \text{ 时, } 4! a_4 &= \beta_1; i=1 \text{ 时, } 5! a_5 = \beta_2; i \in (1, n) \\ \text{时, } a_{i+4} &= 0; i=n \text{ 时, } a_{n+4} (n+4)! / n! = -\alpha_3 a_0; \\ i=n+1 \text{ 时, } a_{n+5} (n+5)! / (n+1)! &= -\alpha_2 a_0 - \\ \alpha_3 a_1; i \geq n+2 \text{ 时, } a_{i+4} (n+4)! / n! &= -\alpha_1 a_{i-n-2} - \\ \alpha_2 a_{i-n-1} - \alpha_3 a_{i-n}. \end{aligned}$$

$$\begin{cases} x_{(y'=0)} = x_0; \\ dx/dy'_{(y'=0)} = \varphi_0; \\ d^2 x/dy'^2_{(y'=0)} = M_0/(EI); \\ d^3 x/dy'^3_{(y'=0)} = Q_0/(EI); \end{cases} \quad (13)$$

由式(13)得:

$$\begin{cases} a_0 = x_0/0!; \\ a_1 = \varphi_0/1!; \\ a_2 = M_0/(2!EI); \\ a_3 = Q_0/(3!EI); \\ a_4 = \beta_1/4!; \\ a_5 = \beta_2/5!. \end{cases} \quad (14)$$

由于

$$\begin{cases} x_{(y)} = x; \\ dx/dy'_{(y)} = \varphi; \\ d^2 x/dy'^2_{(y)} = M/(EI); \\ d^3 x/dy'^3_{(y)} = Q/(EI); \end{cases} \quad (15)$$

由式(14)~(15)可得:

$$\left\{ \begin{aligned} \psi_{00} &= \frac{1}{0!} y^{i-0} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + 0 - 4]!}{k(n+4)!} \right) y^{k(n+4)} \right]; \\ \psi_{01} &= \frac{1}{1!} y^{i-1} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + 1 - 4]!}{[k(n+4) + 1]!} \right) y^{k(n+4)} \right]; \\ \psi_{02} &= \frac{1}{2!} y^{i-2} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + 2 - 4]!}{[k(n+4) + 2]!} \right) y^{k(n+4)} \right]; \\ \psi_{03} &= \frac{1}{3!} y^{i-3} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + 3 - 4]!}{[k(n+4) + 3]!} \right) y^{k(n+4)} \right]; \\ \psi_{04} &= \frac{1}{4!} y^{i-4} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + 4 - 4]!}{[k(n+4) + 4]!} \right) y^{k(n+4)} \right]; \\ \psi_{05} &= \frac{1}{5!} y^{i-5} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + 5 - 4]!}{[k(n+4) + 5]!} \right) y^{k(n+4)} \right]; \end{aligned} \right. \quad (29)$$

由式(29) 可得:

$$\left\{ \begin{aligned} \psi_{0i} &= \frac{1}{(i-0)!} y^{i-0} + \frac{1}{i!} \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\frac{k(n+4)!}{k(n+4)!} \right) \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + i - 4]!}{[k(n+4) + i]!} \right) y^{k(n+4) + i - 0}; \\ \psi_{1i} &= \frac{1}{(i-1)!} y^{i-1} + \frac{1}{i!} \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\frac{k(n+4)!}{[k(n+4) - 1]!} \right) \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + i - 4]!}{[k(n+4) + i]!} \right) y^{k(n+4) + i - 1}; \\ \psi_{2i} &= \frac{1}{(i-2)!} y^{i-2} + \frac{1}{i!} \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\frac{k(n+4)!}{[k(n+4) - 2]!} \right) \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + i - 4]!}{[k(n+4) + i]!} \right) y^{k(n+4) + i - 2}; \\ \psi_{3i} &= \frac{1}{(i-3)!} y^{i-3} + \frac{1}{i!} \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\frac{k(n+4)!}{[k(n+4) - 3]!} \right) \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + i - 4]!}{[k(n+4) + i]!} \right) y^{k(n+4) + i - 3}; \end{aligned} \right. \quad (30)$$

由式(30) 可得:

$$\psi_{ji} = \frac{1}{(i-j)!} y^{i-j} + \frac{1}{i!} \sum_{k=1}^{\infty} (-\alpha_3)^k \cdot \left(\frac{k(n+4)!}{[k(n+4) - j]!} \right) \cdot \left(\prod_{k=1}^k \frac{[k(n+4) + i - 4]!}{[k(n+4) + i]!} \right) y^{k(n+4) + i - j}. \quad (31)$$

由式(28) ~ (31) 可得通解表达式:

$$\left\{ \begin{aligned} x &= \sum_{i=0}^5 i! \psi_{0i} a_i; \\ \varphi &= \sum_{i=0}^5 i! \psi_{1i} a_i; \\ M &= \sum_{i=0}^5 i! \psi_{2i} a_i; \\ Q &= \sum_{i=0}^5 i! \psi_{3i} a_i. \end{aligned} \right. \quad (32)$$

2 通解的初值

由第1节可得,桩身位移 x ,转角 φ ,弯矩 M 和剪力 Q 均可由 a_0 、 a_1 、 a_2 、 a_3 、 a_4 和 a_5 的值来确定,故归根结底是确定上述6个值。 a_4 、 a_5 由外部荷载直接确定,见图1,与桩身支承无关;其余4个值可由已知条件或支承条件确定,根据不同支承条件可分为以下几种。桩顶支承条件:已知 M_0 和 Q_0 的自由支承、已知 x_0 和 M_0 的铰支承、已知 x_0 和 φ_0 的固定支承和已知 φ_0 和 Q_0 的竖向固定支承;桩端支承条件:已知 M_h 和 Q_h 的自由支承、已知 x_h 和 M_h 的铰支承、已知 x_h 和 φ_h 的固定支承、已知 Q_h 的弹性自由支承和已知 x_h 的弹性铰支承,最后两个桩端支承条件还包含如下关系:

$$M_h = -\varphi_h C_0 I_0. \quad (33)$$

式中: I_0 为基底面积对其形心轴的抗弯惯性矩; C_0 为基底土的竖向地基系数, $C_0 = m_0 h$ 。

式(16)、(31)与上述两表联立即可解得 a_0 、 a_1 、 a_2 、 a_3 ,由文献[4-5]得桩顶未知初值通式如下:

$$a_p(0) = \sum_{r=2}^5 f_{pr} a_r(0) \quad (p = \eta, \zeta). \quad (34)$$

式中: $a_p(0)$ 为待求的桩顶未知初值; $a_r(0)$ 为已知的荷载初值; f_{pr} 为桩顶未知初值计算的无量纲系数,计算如下式:

$$f_{\eta r} = ((\psi_{\alpha\zeta}(h)\psi_{\beta r}(h) - \psi_{\beta\zeta}(h)\psi_{\alpha r}(h)) + K_h(\psi_{\gamma\zeta}(h)\psi_{\theta r}(h) - \psi_{\theta\zeta}(h)\psi_{\gamma r}(h)))/((\psi_{\alpha\eta}(h)\psi_{\beta\zeta}(h) - \psi_{\beta\eta}(h)\psi_{\alpha\zeta}(h)) + K_h(\psi_{\gamma\eta}(h)\psi_{\theta\zeta}(h) - \psi_{\theta\eta}(h)\psi_{\gamma\zeta}(h))). \quad (35)$$

$$f_{\zeta r} = ((\psi_{\beta\eta}(h)\psi_{\alpha r}(h) - \psi_{\alpha\eta}(h)\psi_{\beta r}(h)) + K_h(\psi_{\theta\eta}(h)\psi_{\gamma r}(h) - \psi_{\gamma\eta}(h)\psi_{\theta r}(h)))/((\psi_{\alpha\eta}(h)\psi_{\beta\zeta}(h) - \psi_{\beta\eta}(h)\psi_{\alpha\zeta}(h)) + K_h(\psi_{\gamma\eta}(h)\psi_{\theta\zeta}(h) - \psi_{\theta\eta}(h)\psi_{\gamma\zeta}(h))).$$

$$\psi_{\beta\eta}(h)\psi_{\alpha\zeta}(h) + K_h(\psi_{\gamma\eta}(h)\psi_{\theta\zeta}(h) - \psi_{\theta\eta}(h)\psi_{\gamma\zeta}(h)). \quad (36)$$

$$\psi_{pr}(Y) = \frac{Y^{r-p}}{\Gamma(r-p+1)} + \frac{1}{\Gamma(r)} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cdot \frac{\Gamma[k(n+4)+r]}{\Gamma[k(n+4)+r-p+1]} \prod_{k=1}^k \frac{\Gamma[k(n+4)+r-4]}{\Gamma[k(n+4)+r]} \cdot Y^{k(n+4)+r-p} \quad (p=0 \sim 3, r=0 \sim 5). \quad (37)$$

式中: k, n 均为整数, $Y = \gamma(\alpha_3)^{\frac{1}{n+1}}$. 下标 $\alpha, \beta, \gamma, \theta$ 与底端支承条件有关: 自由支承 $K_h = 0, \alpha = 2, \beta = 3$; 铰支支承 $K_h = 0, \alpha = 0, \beta = 2$; 固定支承 $K_h = 0, \alpha = 0, \beta = 1$; 弹性自由支承 $K_h = C_0 I_0 / (\alpha EI), \alpha = 2, \beta = 3, \gamma = 1, \theta = 3$; 弹性铰支支承 $K_h = C_0 I_0 / (\alpha EI), \alpha = 0, \beta = 2, \gamma = 0, \theta = 1$. 下标 r 与荷载初值有关, 当 r 分别为 2, 3, 4, 5 时, 表示桩承受顶端力矩顶端力均布荷载三角形分布荷载的单独作用. 下标 η 和 ζ 则表示欲求的未知初值, 与桩底支承受力条件有关: 自由支撑取 0, 1; 铰支撑取 1, 3; 固定支撑取 2, 3; 竖向固定支撑取 0, 2.

3 结论

笔者推导出了考虑计算宽度非线性的横向受荷桩的通解如式(16) ~ (17). 为使通解简单实用, 笔者还推导了计算宽度为常数的横向受荷桩的通解如式(32): 若使 $y_0 = 0$, 就等价于范文田通解; 若使 $q_0 = 0, n_0 = 0$, 就等价于王伯惠通解. 同时, 总结了目前常用的桩端初值, 使得整个基于地基系数法的桩身内力计算方法更加完整和实用.

参考文献:

- [1] 常保平. 多年冻土地区冻土地温和季节融深对桩基地基系数的影响[J]. 冰川冻土, 1988, 19(1): 15-21.
- [2] 黄杰, 王旭. 横向受载桩计算宽度的非线性模型及其解[J]. 四川建筑, 2005, 25(5): 51-52.
- [3] 范文田. 侧向梯形荷载受力桩的通解[J]. 铁道学报, 1980, 20(4): 58-63.
- [4] 张耀年. 横向受荷桩的通解[J]. 岩土工程学报, 1998, 20(1): 84-86.
- [5] 张耀年. 横向受荷桩分析与计算的地基系数法[J]. 福建建设科技, 2008(6): 1-3.
- [6] 王伯惠. 横向荷载作用下不同土层内变截桩的一般解[J]. 东北公路, 1992(4): 27-37.
- [7] 徐风云, 王伯惠. 嵌岩桩的横向承载能力计算二[J]. 东北公路, 1993(2): 19-30.
- [8] 徐风云, 王伯惠. 嵌岩桩的横向承载能力计算(一)[J]. 东北公路, 1993(1): 46-56.
- [9] 王伯惠. 中国钻孔灌注桩新发展[M]. 北京: 人民交通出版社, 1999: 74-83.
- [10] 黄杰, 王旭. 横向受载桩计算宽度的非线性模型及其解[J]. 四川建筑, 2005, 25(5): 51-54.
- [11] 王玉萍, 王玉峰, 王旭. 多年冻土地区推力桩的地基系数双参数法计算模型[J]. 四川建筑, 2014, 34(1): 75-76.

The Study of Lateral Load Pile General Solution Based on Modulus of Subgrade Reaction

HE Shuanhai, HE Xiaowei

(School of Highway, Chang'an University, Xi'an 710064, China)

Abstract: In order to improve the general solution of pile internal force calculation based on foundation coefficient method, the general solution considering the width nonlinearity of piles was derived based on Winkler assumption and method of power series, and the linear general solution was proposed through simplification. The present computing theory based on foundation coefficient method was developed and unified as a result of this study. From the analysis of initial value conditions, 4 kinds of pile top boundary and 5 kinds of pile end boundary, which are commonly used at present, were summarized.

Key words: modulus of subgrade reaction; laterally loaded pile; general solution; foundation ratio; boundary conditions

钢-砼混合梁斜拉桥的颤抖振时域分析

李宇¹, 李钊¹, 李琛²

(1. 长安大学 旧桥检测与加固技术交通行业重点实验室, 陕西 西安 710064; 2. 长安大学 建筑学院, 陕西 西安 710064)

摘 要: 以大跨钢-砼混合梁斜拉桥为研究对象, 利用三次拉格朗日多项式插值的改进谐波合成法模拟了大桥所处场地的脉动风荷载。在此基础上, 采用 ANSYS 建立了大跨斜拉桥的有限元模型, 并利用 ANSYS 的 APDL 语言进行了二次开发, 编制了能够计算钢-砼混合梁斜拉桥颤抖振响应的程序。研究结果表明: 大跨钢-砼混合梁斜拉桥的颤抖振响应不仅会引起桥梁疲劳振动, 进而降低桥梁构件的使用寿命, 而且会危及施工人员和机械的安全, 影响成桥运营后的行人舒适性和高速行驶的安全性。

关键词: 斜拉桥; 颤振; 抖振; 非线性; 时域分析

中图分类号: U442.5 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.016

0 引言

随着我国桥梁工程建设的迅猛发展, 许多大跨径的斜拉桥得以建成, 而它们的风致振动问题——特别是颤抖振响应, 也成为工程界研究的热点。项海帆等^[1]阐述了特大跨度桥梁抗风研究的新进展; 李永乐等^[2]对桥梁抖振时域和频域分析的一致性进行了研究; 韩万水等^[3]对大跨度斜拉桥抖振时域分析进行了理论实例验证及影响因素分析; 张志田等^[4]、DEODATIS 等^[5]进行了基于气动新模型的大跨度桥梁的频域抖振分析; 马麟等^[6]采用改进谐波合成法对杭州湾跨海大桥风场进行了模拟; 王中文等^[7]对钢桥塔裸塔状态涡激振动和斜拉索的风致振动进行了减振方法的研究; CHEN 等^[8]、DAVENPORT 等^[9]等国外学者也对大跨桥梁的抖振响应进行研究; 袁小钦等^[10]研究了 MR-TMD 减振系统, 并探讨了该系统在连续箱梁桥振动控制中的作用效果; 宫成等^[11]以施工期间的高墩大跨斜拉桥为研究对象, 研究了控制结构风致振动的措施; 唐启等^[12]针对分幅式斜拉桥施工期抗风措施展开研究, 并提出了对应的制振措施。笔者以钢-砼混合梁斜拉桥为工程背景, 利用 ANSYS 参数化设计语言 (APDL) 编制了计算

程序, 对大跨桥梁进行了颤抖振时域分析。

1 基本理论

作用于大跨桥梁上的外荷载等效节点力为:

$$F_b(t) = F_{bg} + F_{stb} + F_{bub} + F_{seb}, \quad (1)$$

式中: F_{bg} 为桥梁自重; F_{stb} 为静风荷载; F_{bub} 为抖振荷载; F_{seb} 为结构自激励。假设在风荷载作用下, 桥梁静止不动, 此时的定常反应^[1]为风静力作用 F_{stb} 。风轴坐标下的静力三分力为

$$\begin{aligned} F_D &= \frac{1}{2} \rho U^2 C_D B; \\ F_L &= \frac{1}{2} \rho U^2 C_L B; \\ F_M &= \frac{1}{2} \rho U^2 C_M B^2. \end{aligned} \quad (2)$$

式中: F_D 、 F_L 、 F_M 为阻力、升力和扭矩; C_D 、 C_L 、 C_M 为 F_D 、 F_L 、 F_M 的系数; A 、 B 为主梁投影高度和宽度; ρ 为大气密度; U 为平均风速。

引入气动导纳后, 抖振力 F_{bub} 可表示为

$$\begin{aligned} D(t) &= \frac{1}{2} \rho U^2 B C_D(\alpha) + \frac{1}{2} \rho U^2 B \left[C_D(\alpha) \chi_{Du} \cdot \right. \\ &\quad \left. \frac{2u(t)}{U} + C'_D(\alpha) \chi_{Dw} \frac{w(t)}{U} \right]; \end{aligned} \quad (3a)$$

收稿日期: 2015-09-30; 修订日期: 2015-11-19

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (51408042); 陕西省自然科学基金资助项目 (2014JQ7253)

作者简介: 李宇 (1982—), 男, 福建福州人, 长安大学副教授, 博士后, 主要从事桥梁抗震及抗风研究, E-mail: liyu@chd.edu.cn.

$$L(t) = \frac{1}{2}\rho U^2 B C_L(\alpha) + \frac{1}{2}\rho U^2 B \left[C_L(\alpha) \chi_{Lu} \frac{2u(t)}{U} + (C'_L(\alpha) + C_D(\alpha)) \chi_{Lw} \frac{w(t)}{U} \right]; \quad (3b)$$

$$M(t) = \frac{1}{2}\rho U^2 B^2 C_M(\alpha) + \frac{1}{2}\rho U^2 B^2 \left[C_M(\alpha) \chi_{Mu} \frac{2u(t)}{U} + C'_M(\alpha) \chi_{Mw} \frac{w(t)}{U} \right]. \quad (3c)$$

式中: $D(t)$ 、 $L(t)$ 、 $M(t)$ 为抖振力的升力、阻力、升力矩分量; χ_{Du} 、 χ_{Dw} 、 χ_{Lu} 、 χ_{Lw} 、 χ_{Mu} 、 χ_{Mw} 为气动导纳; $C_D(\alpha)$ 、 $C_L(\alpha)$ 、 $C_M(\alpha)$ 为阻力、升力和扭矩系数(考虑风攻角 α 影响); C'_L 、 C'_D 、 C'_M 为 $C_D(\alpha)$ 、 $C_L(\alpha)$ 、 $C_M(\alpha)$ 对 α 的导数; $u(t)$ 、 $w(t)$ 为水平及垂直向的风速, 作用单位长度桥面的自激力 $F_{seb}^{[1]}$:

$$\begin{cases} D_{se} = \frac{1}{2}\rho U^2 B \left[KP_1^* \frac{p'}{U} + KP_2^* \frac{B\theta'}{U} + K^2 P_3^* \alpha + K^2 P_4^* \frac{p}{B} \right]; \\ L_{se} = \frac{1}{2}\rho U^2 B \left[KH_1^* \frac{h'}{U} + KH_2^* \frac{B\theta'}{U} + K^2 H_3^* \alpha + K^2 H_4^* \frac{h}{B} \right]; \\ M_{se} = \frac{1}{2}\rho U^2 B^2 \left[KA_1^* \frac{h'}{U} + KA_2^* \frac{B\theta'}{U} + K^2 A_3^* \alpha + K^2 A_4^* \frac{h}{B} \right]. \end{cases} \quad (4)$$

式中: D_{se} 、 L_{se} 、 M_{se} 为 F_{seb} 的升力、阻力、升力矩分量; $K = fB/U$ 是无量纲折算频率; f 为圆频率; p 、 h 和 θ 分别为横向、竖向和扭转向变形; P_i^* 、 H_i^* 和 A_i^* ($i = 1 \sim 4$) 为 p 、 h 和 θ 向气动导数^[1].

2 建立有限元模型

澜沧江大桥主桥为双塔三跨双索面钢-砼组合梁斜拉桥, 总长 700 m, 桥宽 26 m, 跨径布置 150 m + 400 m + 150 m. 主跨采用 'π' 形钢-混凝土组合梁, 边跨采用预应力混凝土加劲梁. 用 ANSYS 建立了图 1 的有限元模型, 步骤如下: ①用 Beam4 梁单元模拟加劲梁、主塔、辅助墩、过渡墩、刚臂等, 其中加劲梁采用刚度和质量一致的等代方法, 即先计算出钢-混凝土组合梁的截面特性, 可得到截面的两个方向的抗弯惯性矩、自身抗扭惯性矩以及等效面积, 然后以实参数的形式赋予 Beam4 单元; ②用 Link10 单元模拟斜拉索; ③用 MASS21 质量单元模拟防撞护栏、检修道护栏、桥面铺装、横隔梁等质量及质量惯性矩; ④定义 x 、 y 、 z 为顺桥、竖桥和横桥向. 主要振型频率及等效质量如表 1 和图 2~3 所示.

表 1 主要自振频率及等效质量

Tab.1 Natural frequency and equivalent mass

振型的描述	振型	频率/Hz	等效质量和质量惯性矩
主梁对称竖弯	2	0.344 0	(0.390 830E + 5) kg/m
主梁对称扭转	5	0.591 8	(0.234 658E + 7) kg · m ² /m



图 1 有限元模型
Fig.1 FEA model

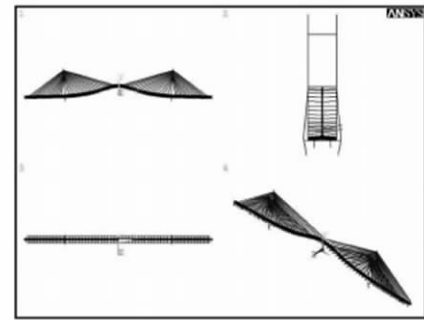


图 2 第 2 阶振型
Fig.2 Modal 2

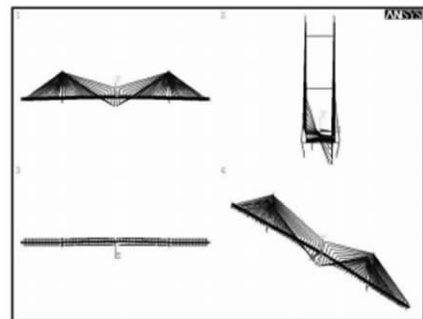


图 3 第 5 阶振型
Fig.3 Modal 5

3 模拟脉动风场

采用改进谐波合成法^[6]模拟脉动风场, 并考虑 Davenport 相关函数修正脉动风沿桥轴的空间效果, 以 Simiu 谱(横向)和 Panofsky 谱(竖向)为目标谱, 用 MATLAB 编程对主梁、桥塔、过渡墩及辅助墩的横向和竖向脉动风场进行模拟(基本参数见表 2). 图 4~5 给出桥梁关键点的横桥与竖桥向风速时程及它们功率谱和目标功率谱的对比, 可知: 模拟的功率谱与目标功率谱吻合理想, 即模拟的风场可作为抖振计算使用.

表 2 风场模拟基本参数表

Tab.2 Basic parameters of wind field simulation

场地	设计风速/(m · s ⁻¹)	点数	步长/s	时长/s
D	20.28	151	0.25	1 200

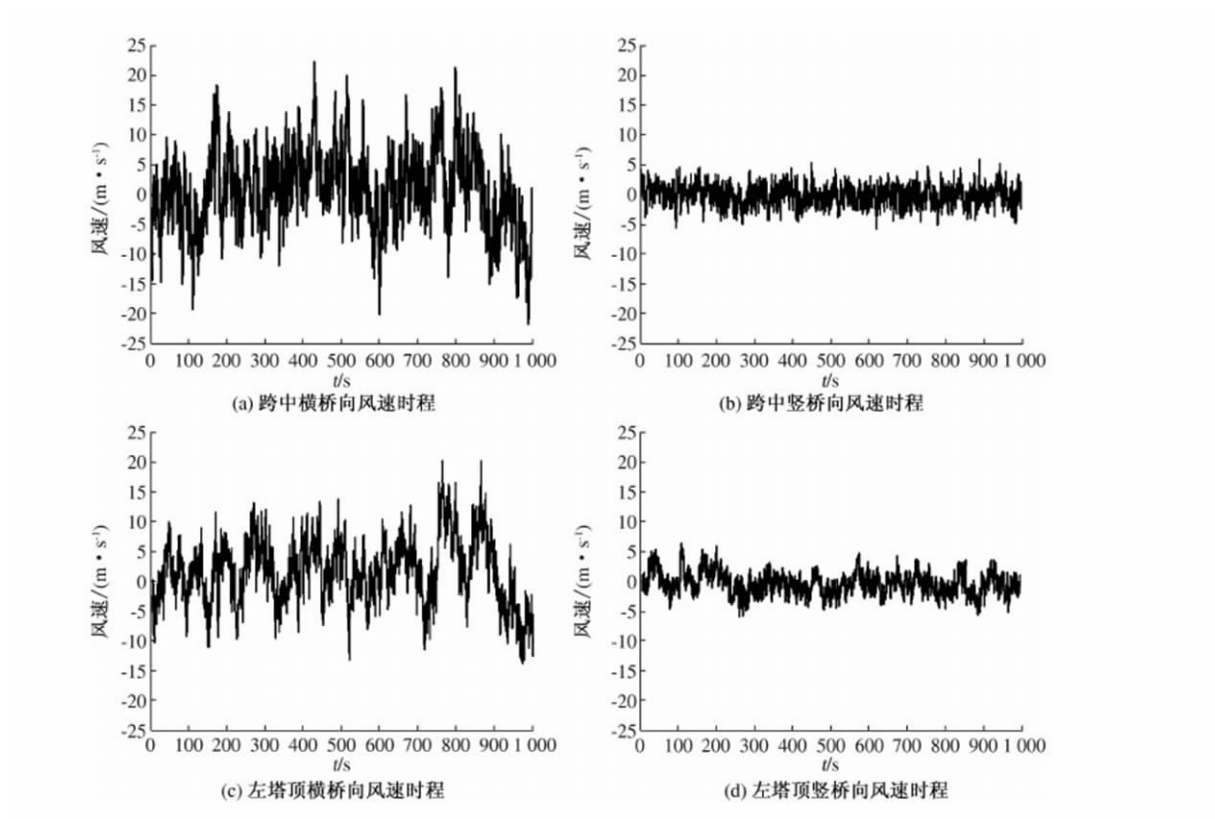


图4 各关键点脉动风速时程

Fig.4 Turbulent wind speed of several critical point

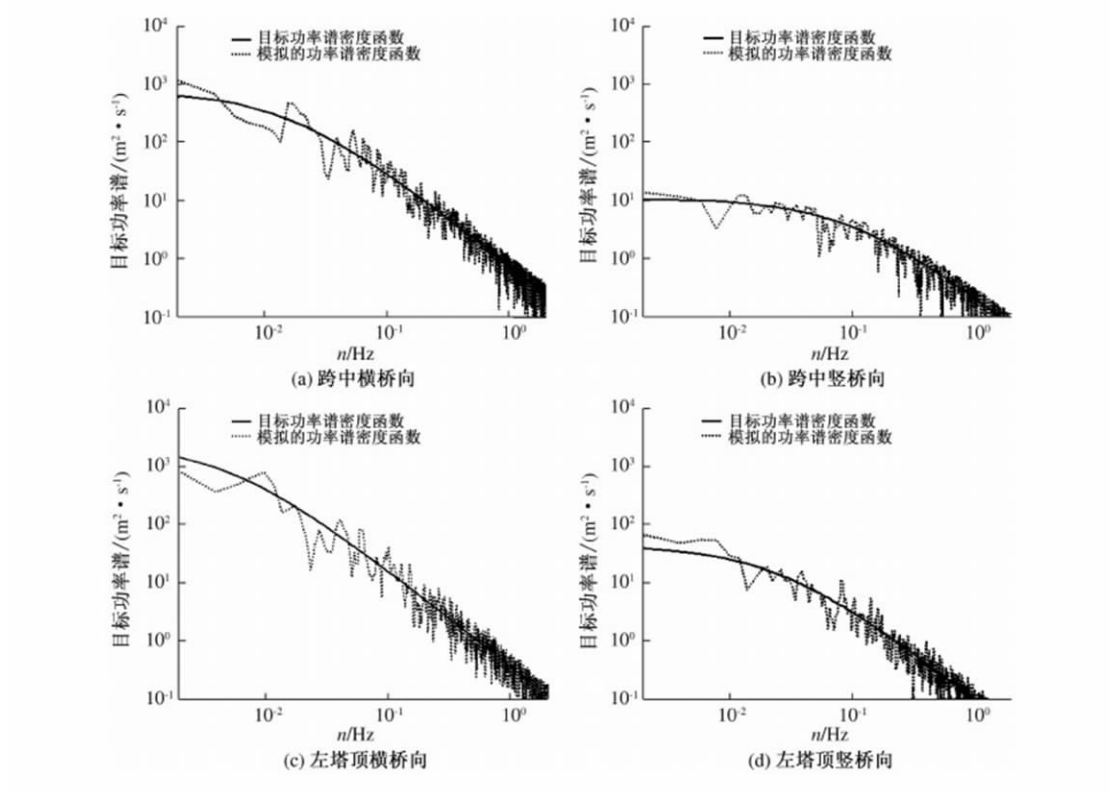


图5 脉动风速模拟风功率谱和目标功率谱

Fig.5 Wind power spectrum and target spectrum of turbulent wind speed

4 计算结果分析

笔者综合考虑桥梁自重、静风荷载非线性、Davenport 准定常抖振力、Scanlan 自激力、结构阻尼等,编制了基于 ANSYS 软件的 APDL 参数化设计语言,实现了大跨斜拉桥的三维非线性抖振时域分析.对该桥成桥状态初始设计方案进行了 0° 风攻角和设计基准风速下的风荷载响应分析,并给出主梁和主塔上多个控制截面的风荷载位移和内力响应.其中,位移与坐标轴同向为正,反之为负;内力方向依赖计算风向,由于计算风向存在相向变化,

因而内力正负号无实际意义.图 6 给出了主梁沿跨度表示的 3 个方向上的位移 RMS 值.图 7 给出了主梁跨中的 3 个方向上的位移时程曲线.图 8 给出了左主塔底部的弯矩时程曲线.从图 7 可知:①抖振属于风致限幅振动响应,一般不引起大跨桥梁灾难性损坏,但由于抖振发生频率较高,将会引起大跨桥梁的疲劳振动,进而导致大跨桥梁局部构件寿命的缩短;②过大的抖振响应会使大跨桥梁施工期间的振动,进而危及施工人员的安全和施工机械的使用,而且也会影响大跨桥梁成桥运营后的行人舒适性和高速行驶的安全性.

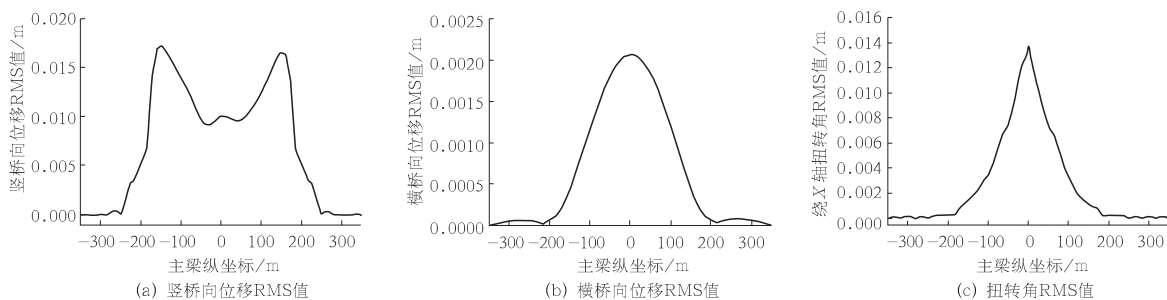


图 6 主梁沿跨向位移 RMS 值

Fig. 6 RMS of displacement along main beam

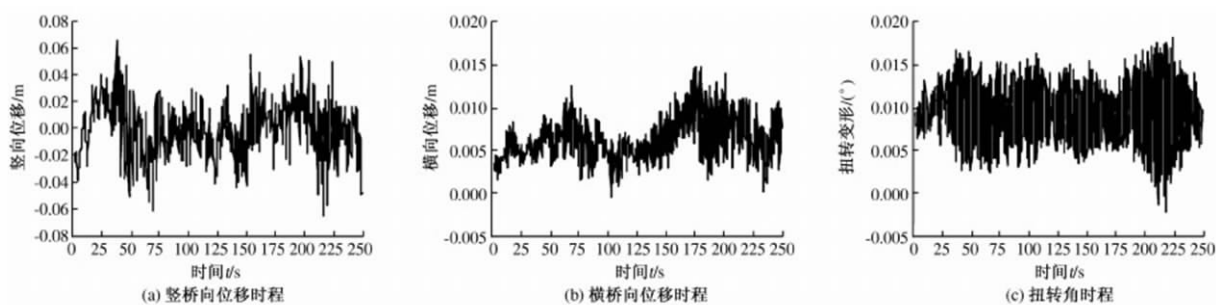


图 7 主梁跨中位移时程

Fig. 7 Time-history displacement of mid-span

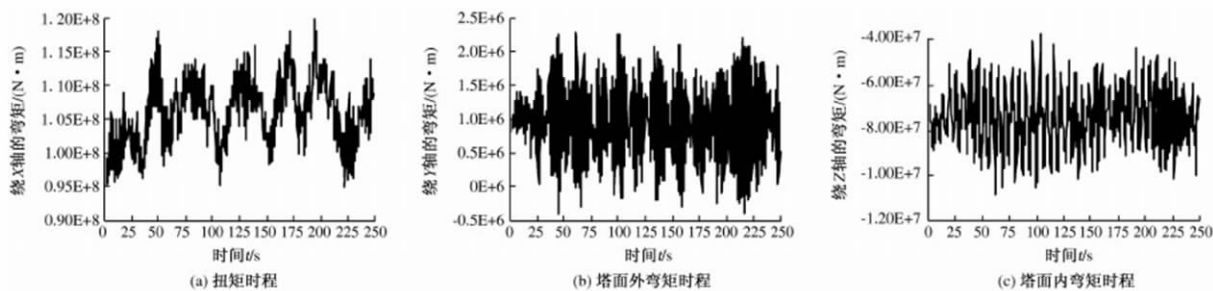


图 8 左主塔底部弯矩时程

Fig. 8 Time-history moment at the bottom of left tower

5 结束语

以澜沧江大桥为工程背景,利用三次拉格朗

日多项式插值的改进谐波合成法对大桥所处场地的脉动风荷载时程进行模拟,并利用 ANSYS 的 APDL 语言进行了二次开发,编制了能够计算钢-

砼混合梁斜拉桥颤抖振响应的程序,并对其进行研究,从中可知:大跨斜拉桥抖振位移的最大值发生在桥梁的不同位置——最大横桥向和扭转变形抖振响应都发生于跨中,而最大纵向位移抖振响应则发生于1/3和2/3跨。由此可见,大跨钢-砼混合梁斜拉桥的颤抖振响应会引起桥梁疲劳振动,进而降低桥梁构件的使用寿命,而且会危及施工人员和机械的安全,影响成桥运营后的行人舒适性和高速行驶的安全性。

参考文献:

- [1] 项海帆,陈艾荣.特大跨度桥梁抗风研究的新进展[J].土木工程学报,2003,36(4):1-8.
- [2] 李永乐,廖海黎,强士中.桥梁抖振时域和频域分析的一致性研究[J].工程力学,2005,22(2):179-183.
- [3] 韩万水,陈艾荣,胡晓论.大跨度斜拉桥抖振时域分析理论实例验证及影响因素分析[J].土木工程学报,2006,39(6):66-71.
- [4] 张志田,葛耀君,陈政清.基于气动新模型的大跨度桥梁频域抖振分析[J].工程力学,2006,23(6):94-101.
- [5] DEODATIS G. Simulation of ergodic multivariate stochastic processes [J]. Journal of engineering mechanics, 1996,122(8):778-787.
- [6] 马麟,刘健新,韩万水.基于改进谐波合成法的杭州湾跨海大桥风场模拟研究[J].郑州大学学报(工学版),2008,29(1):56-60.
- [7] 王中文,朱宏平,廖海黎,等.钢桥塔裸塔状态涡激振动的TLD减振方法研究[J].华中科技大学学报(城市科学版),2009,26(2):9-11.
- [8] CHEN X, MATSUMOTO M, KAREEM A. Aerodynamic coupled effects on flutter and buffeting of bridges [J]. Journal of engineering mechanics, 2000,126(1):17-26.
- [9] DAVENPORT A G. Buffeting of a suspension bridge by storm winds [J]. Journal of the structural division, 1962, 88(3):233-270.
- [10] 袁小钦,刘习军,张素侠. MR-TMD 减振系统对连续箱梁桥振动控制研究[J]. 振动与冲击, 2012, 31(20):153-158.
- [11] 宫成,刘志文,谢钢,等.高墩大跨斜拉桥悬臂施工工期风致振动控制[J].工程力学,2015,32(增刊):122-128.
- [12] 唐启,李鑫,游新鹏,等.基于抖振分析的分幅式斜拉桥施工期抗风措施研究[J].中国港湾建设,2015,35(6):20-25.

Flutter and Buffeting Analysis for Cable - stayed Bridge with Steel - concrete Girder

LI Yu¹, LI Zhao¹, LI Chen²

(1. Key Laboratory of Ministry of Communications for Bridge Detection & Reinforcement Technology, School of Highway, Chang'an University, Xi'an 710064, China; 2. School of Architecture, Chang'an University, Xi'an 710064, China)

Abstract: Based on long-span and steel-concrete bridge, the perfect stochastic fluctuating wind field process is generated to simulate stochastic wind loads by using improved WAWS method. Then, the FEA model of long-span cable-stayed bridge is established by using ANSYS. Based on ANSYS parametric design language, one calculation program is prepared to calculate the flutter and buffeting analysis for cable-stayed bridge with steel-concrete composite girder. Some meaningful conclusions are drawn that flutter and buffeting would cause vibration fatigue to reduce the lifetime of bridge members and endanger the safety of builders and machines. And, flutter and buffeting also have bad effects on pedestrian comfort and the security of high-speed road. Some meaningful references, which are used to calculate flutter and buffeting of long-span and steel-concrete bridges, are provided for further research on wind-induced vibration for long-span bridges.

Key words: cable-stayed bridge; fluttering response; buffeting response; nonlinear; time domain analysis

文章编号: 1671-6833(2016)03-0074-04

基于虚拟现实技术的十字轴锻造过程仿真

王 栋, 张晓晴

(郑州大学 机械工程学院, 河南 郑州 450001)

摘 要: 采用 DEFORM-3D 对锻造过程进行仿真计算精度很高, 但基于图形的动画效果不理想, 不能提供交互可视化. 因此, 提出了基于 DEFORM-3D 和 Open Inventor 实现虚拟锻造仿真的新方法, 通过 C++ 编码实现几何模型数据格式的转换, 使 Open Inventor 可读入有限元计算的几何模型, 并运用 Open Inventor 的传感器机制、引擎机制等, 完成十字轴几何模型的塑性变形和上模的下压运动, 且在 Open Inventor 平台上实现锻造过程的虚拟仿真.

关键词: 虚拟现实; 锻造; 数据转换; 场景图

中图分类号: TH16

文献标志码: A

doi: 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.017

0 引言

锻造是一个复杂的塑性变形过程, 用有限元法分析计算的结果准确, 但非技术人员或客户很难理解这些数据, 需将分析数据进行可视化展示, 帮助其理解. 虚拟现实技术具有非常好的展示能力, 但没有分析能力和建立复杂模型的能力. 2013 年 Michelin 公司已经将有限元和虚拟技术软件 Open Inventor 集成在一起, 为仿真结果提供复杂的可视化. 国内这方面的研究还不成熟, 曹玉超等^[1] 建立基于 Open Inventor 冷弯成型机虚拟仿真平台, 但仿真时运动的钢板被简化为静态的钢板, 采用运动纹理实现视觉上的轧辊变形过程, 仿真效果跟实际有差距. 赵德金等^[2] 采用 MFC 和 OpenGL 技术开发了一个面向虚拟制造的板材加工仿真系统, 模型直接应用 OpenGL 编写, 模型较粗糙、简单, 需进一步研究读取其他模型文件的功能. 周国朝等^[3] 开发了 XPS 挤塑板生产工艺过程的虚拟现实平台, 但由于软件之间的兼容性, 对模型进行了简化, 影响仿真效果的真实性. 目前, 塑性变形工件几何模型的建立仍是虚拟制造仿真过程的重大问题. 笔者运用 C++ 编码将 DEFORM-3D 精确计算的几何模型, 转换成 Open Inventor 可读取的数据格式, 该方法简单直接, 很好地解决了虚拟加工中建立精确模型的问题, 并成功实现了锻造加工过程的虚拟仿真.

1 有限元仿真

1.1 建立有限元仿真模型

十字轴是某公司生产的汽车联轴器上的重要零件, 其锻造由预锻和终锻两部分组成. 以终锻过程为例, 在 DEFORM-3D 中载入十字轴和上、下模具的几何模型, 并设置模拟参数, 如图 1 所示. 材料选用材料库中的 AISI-8620, 模拟温度 1 100 °C, 剪切摩擦, 摩擦因数为 0.3, 设定上模具运动速度 10 mm/s, 下模具固定, 模拟步长 0.02 mm, 每间隔 10 步保存一次数据.

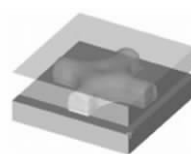


图 1 十字轴和模具的相对位置关系

Fig.1 The relative positional relationship between the cross shaft and dies

1.2 仿真数据输出

十字轴在锻造过程中发生塑性流动并逐渐成形, 通过有限元运算, 仿真过程的每一步数据都保存在 DEFORM-3D 数据库文件(.DB) 中, 可提取任何时间段上下模具和十字轴的三维几何模型. 其数据格式为 STL, 有 2 种形式: Binary 和 ASCII. ASCII 码格式具有良好的可读性, 可通过文本编

收稿日期: 2015-09-23; 修订日期: 2015-11-19

基金项目: 国家高技术研究发展计划资助项目(863 计划)(2012AA041801)

作者简介: 王栋(1970—), 男, 河南沁阳人, 郑州大学教授, 博士, 主要从事抗疲劳制造技术和虚拟制造技术研究,
E-mail: wangdong@zzu.edu.cn.

辑器进行查看和修改^[4],因此主要研究 ASCII 数据格式之间的转换。

2 格式转换

实现 STL 格式向 IV 格式转换有 3 种方法:①利用转换工具(兼容两种数据格式的软件),但有一定的局限性;②利用 Open Inventor 的拓展模块 Data Converter,但对软件有一定的要求;③利用 C++ 编程实现数据转换,具有普遍适用性,效果较好。采用第 3 种方法实现 STL 格式向 IV 格式转换。

为了研究两种数据格式之间的关系,在 SolidWorks 中建立简单的正方体模型,另存为 STL 和 IV 两种数据格式,进行对比分析。

2.1 STL 数据格式

STL 格式的几何模型由大小形状各异的三角面片近似还原得到。分析如下所示正方体的 STL 数据:

```
SOLID DEFORM-3D STL FILE
FACET NORMAL 1 0 0
  OUTER LOOP
    VERTEX 10 10 10
    VERTEX 10 0 10
    VERTEX 10 10 0
  ENDLOOP
ENDFACET
```

第一行为说明行,从第二行开始记录数据。首先是三角面的空间法向量,以 FACET NORMAL 开始,其后跟向量数据,接着是一个循环,依次记录三角面片 3 个顶点的坐标,以 OUTER LOOP 开始,END LOOP 结束循环,END FACET 标志着第一个三角面片记录完毕,继续记录下一个三角面片数据,直到将全部三角形面片数据记录完毕^[5]。

2.2 IV 数据格式

Open Inventor 所支持的 IV 格式数据是几何模型表面三角网格化得到的,其数据文件由多部分组成,主要包括文件头部、节点信息、域关系、引擎数据等^[6]。例如,如下所示正方体的 IV 数据由两部分组成,第一部分是正方体表面所有三角面顶点坐标,在域名 Point 后为坐标数据;第二部分为每一个三角面顶点的索引编号,在域名 CoordIndex 后紧跟编号数据。

```
Coordinate3 { point [ -0.005 -0.005 0 ,
                      -0.005 -0.005 0.01 , ... ]
}
```

```
IndexedFaceSet { coordIndex [ 7, 5, 6, -1,
                             6, 5, 4, -1, ... ]
}
```

2.3 格式转化流程图

通过数据对比发现,两种数据是等效的,只是模型的大小尺寸和空间坐标位置不同,相当于三维几何模型进行了缩放和平移变换,通过编程可实现两种数据格式之间的转换。从 STL 中提取顶点坐标数据,并对其进行编号,流程图如图 2 所示。

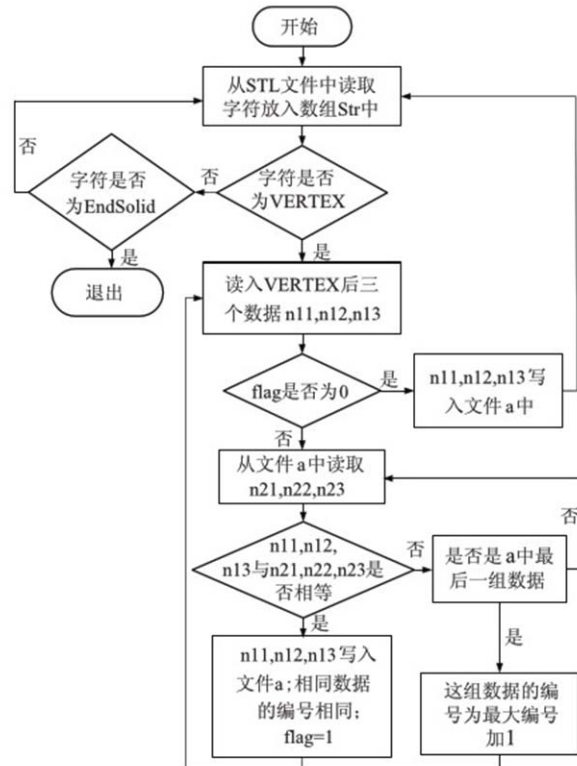


图2 从 STL 提取数据流程图

Fig. 2 The flowchart of picking up data from STL

创建 IV 数据文件是一个字符匹配的过程,流程图如图 3 所示,先写入节点、域、路径等对象的名称,然后输出相应数据值^[7]。

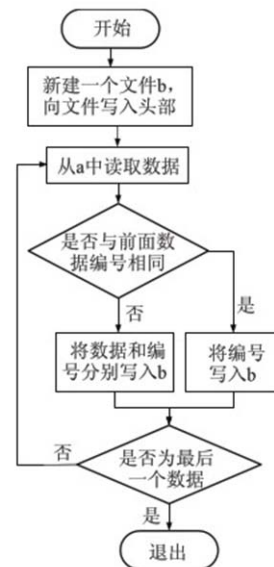


图3 写入 IV 数据转换流程图

Fig. 3 The flowchart of writing data to IV

3 场景图的建立及仿真过程的实现

3.1 建立场景图

场景图可以很好地表示物体的三维几何信息、光照和材料等属性信息,以及构成节点容器的组信息.在场景中执行一个动作,会自动进入自顶向下、自左向右的场景遍历状态^[8].

十字轴锻造过程的虚拟仿真,是将有限元模拟中每一步十字轴的位置及几何形态的信息读入场景,运用传感器机制和回调函数,控制几何模型的交替显现和消失,从而实现十字轴的塑性变形过程.同时,运用域传感器、引擎和平移回调函数控制上模做下压运动.根据场景图的基本原则,建立如图4所示的场景图.

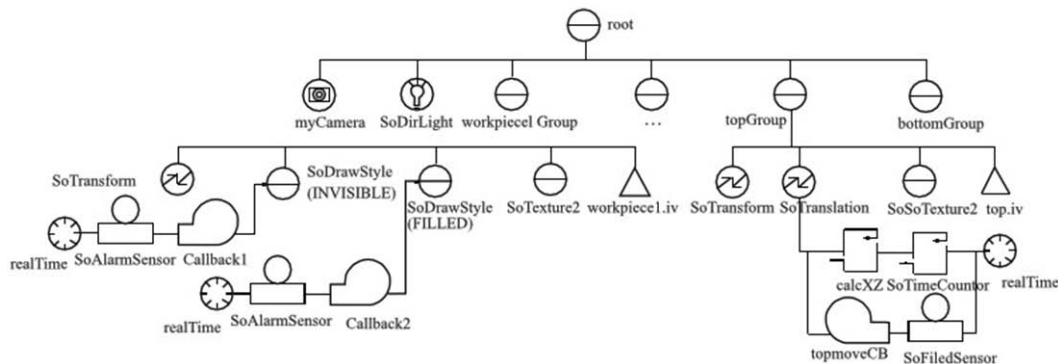


图4 十字轴锻造过程仿真场景图

Fig. 4 Scene graph about simulation of cross shaft's forging process

3.2 锻造过程仿真实现

(1) 几何尺寸的转换.同一模型 STL 数据单位是 Open Inventor 数据单位的 2 000 倍,需将读入模型的尺寸进行相应的缩小,减小系统任务的复杂性.几何模型 X、Y、Z 3 个方向比例因子为 0.000 5,以上模具为例,程序如下:

```
topTransform->scaleFactor. setValue( 0. 000 5,
0. 000 5,0. 000 5); //比例因子
```

```
topGroup-> addChild( topTransform);
```

(2) 上模的下压运动.根据有限元仿真中测得上模行程和保存数据的间隔步数,设置上模运动速度为 0.2 mm/s,沿 -Z 轴方向运动.在实现时采用时间触发回调函数,设定上模运动时间,在设定时间段内,使平移节点(topmove) 的运动控制量打开,置 on 节点的值为 TRUE,上模做平移运动,否则停止^[9].程序如下:

```
double topmove_start =5; //运动起始时间
double topmove_end = 5 + topmove_time; //运
动结束时间
if( time >= topmove_start && time <= top
move_end) //判断是否在设定的运动时间段内
{ topmove-> on. setValue( TRUE); }
else
{ topmove-> on. setValue( FALSE); }
```

在主程序中控制实现上模直线运动,设置运动速度和方向,程序如下:

```
topcalcXZ->expression. setValue( 0," ta = - a *
0. 2"); //设置坐标随时间变化函数,即速度
```

```
topcalcXZ-> expression. setValue( 1," oA =
vec3f( 0,0,-ta)"); //将坐标变化输入到计算引擎
的输出域,即 -Z 轴为运动方向
```

```
topmoveTranslation-> translation. connect From
( &topcalcXZ->oA); //将计算引擎的输出域链接
到上模的平移变换节点上.
```

(3) 十字轴的塑性变形过程.将转换后的十字轴的三维几何模型,按一定的时间顺序交替显现消失.由于 DEFORM-3D 中设置每 10 步保存一次,步长为 0.02 mm,所以上模运动时间 1 s,每步十字轴轮流显现的时间间隔为 1 s.在主程序中为传感器 SoAlarmSensor 编写两个响应函数(Callback1 和 Callback2),分别控制三维模型的显现和消失,并设置触发时间 1 s,到达设定时间就调用相应的响应函数.程序如下:

```
SoAlarmSensor* myAlarm = new SoAlarmSen-
sor ( Callback1, drawStyle); //创建传感器实例对
象,并给定激发时调用的响应函数
```

```
myAlarm-> setTimeFromNow( 0. 0f); //为传感
器设定时间参数
```

```
myAlarm-> schedule(); //调度
```

(4) 仿真效果.在 Windows 系统的 VC++ 平台上实现了锻造的虚拟仿真过程,如图 5 所示,分别为锻造过程的瞬时截图.其中图 5(c) 和(d) 为

上模设置一定的透明效果,便于实时观察十字轴塑性成形过程。

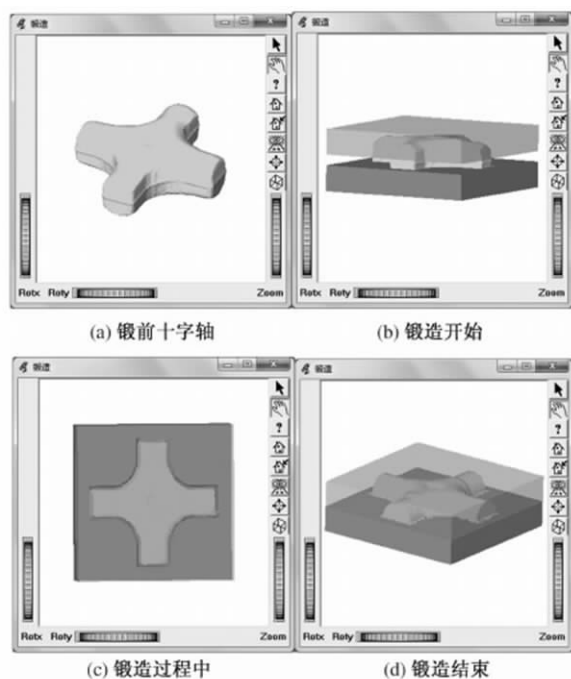


图5 十字轴锻造过程仿真截图

Fig.5 Screen shots about simulation effect of cross shaft's forging process

4 结论

笔者将有限元软件的精确计算结果和虚拟现实软件的展示能力相结合,运用C++编程实现了两者几何模型数据格式之间的转换,在Open Inventor中成功建立塑性变形过程工件的几何模型,并根据场景图实现锻造过程的虚拟仿真。仿真

效果表明,其仿真真实准确,且方法同样适用于其他塑性成型加工过程的仿真。

参考文献:

- [1] 曹玉超. 基于Open Inventor冷弯成型机虚拟样机仿真平台开发[D]. 郑州: 郑州大学机械工程学院, 2012: 11-47.
- [2] 赵德金. 基于虚拟制造的金属板材成型加工仿真技术研究[D]. 南京: 南京理工大学机械工程学院, 2012: 3-83.
- [3] 周国朝. XPS挤塑保温板生产工艺过程的虚拟现实[D]. 石家庄: 河北工程大学机电工程学院, 2014: 2-49.
- [4] 侯增选, 张邦磊, 刘文慧, 等. 基于DXF的露天矿二维与三维数据处理及应用[J]. 计算机应用与软件, 2014, 31(1): 204-207.
- [5] 刘溪, 侯增选, 闫锋欣, 等. Open Inventor数据转换技术的研究[J]. 机床与液压, 2007, 35(8): 194-196.
- [6] 顾邦军, 罗陆锋. 基于Open Inventor的虚拟机床操作系统的研究[J]. 实验技术与管理, 2011, 28(8): 67-72.
- [7] WERNECKE J. The inventor mentor [M]. San Diego: Addison-Wesley, 1994: 280-299.
- [8] 王栋, 马小峰, 李大磊, 等. 基于引擎机制的PECVD工作过程的虚拟仿真[J]. 郑州大学学报(工学版), 2008, 29(3): 54-58.
- [9] 王栋, 曹玉超, 邓福建. 基于虚拟现实技术的链条传动工作过程仿真实现[J]. 机械设计与制造, 2012(8): 212-214.

Working Process Simulation of Cross Shaft Forging Based on Virtual Reality Technology

WANG Dong, ZHANG Xiaoqing

(School of Mechanical Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: The finite element analysis software DEFORM-3D can be used to simulate forging process, and its precision is high, but the animation based on graph is not ideal at present, the post processor can not provide interactive visualization. So a new method based on DEFORM-3D and Open Inventor to achieve the virtual simulation of forging has been proposed. Using C++ to achieve conversion of two data formats, so that the Open Inventor can read in the geometric models of finite element calculation. Using the sensor mechanism, engine mechanism and so on, we complete the movement of top die and plastic deformation of cross shaft during forging, realize the virtual simulation of forging process on Open Inventor platform.

Key words: virtual reality; forging; data convert; scene graph

文章编号: 1671-6833(2016)03-0078-05

全矢支持向量回归频谱预测方法

李凌均¹, 陈超^{1,2}, 韩捷¹, 陈宏¹

(1. 郑州大学 机械工程学院, 河南 郑州 450001; 2. 河南机电职业学院, 河南 郑州 451191)

摘 要: 为了对机械设备进行故障类型和故障部位的准确预测, 提出了全矢支持向量回归的频谱预测新方法. 该方法使用全矢谱信息融合技术对同源双通道信号进行信息融合, 采用支持向量回归对全矢谱特征参数进行预测, 保证了训练数据信息的全面性以及预测结果的准确性. 该方法对振动信号的频谱结构分布情况进行准确预测, 从而为对机组的故障类型和故障部位预测奠定技术基础. 通过对某 1 000 MW 汽轮机轴振进行频谱预测验证结果表明, 该方法在对振动信号频谱结构特征进行预测方面具有较高的预测准确性.

关键词: 全矢谱; 支持向量回归; 时间序列; 频谱预测

中图分类号: TH17 **文献标志码:** A **doi:** 10.10375/j.issn.1671-6833.2016.03.018

0 引言

对设备的振动规律及其发展趋势进行预测可以为故障的发生、发展, 以及发生故障的类型、故障发生部位的预测提供基础^[1]. 由于单通道的分析方法存在信息单一和信息利用不充分的缺点, 而目前对旋转机械振动方面的预测基本限于通频振动幅值、峭度等统计指标的预测, 无法对频谱结构和故障类型做出预测. 文献[2-4]用不同的方法研究了机械设备故障发展变化和性能劣化的趋势, 这些都是集中在对故障和劣化程度、以及剩余寿命的预测, 却没有对频谱结构、故障类型和故障位置的预测. 而同源信息融合的全矢谱技术就如在谐波轨迹的最大强度方向有一个虚拟探头在监测转子信号, 保证了各谐波的最大强度^[5], 使得对频谱进行预测变得有可行而有效.

文献[6-7]提出了基于同源信息融合的全矢谱技术, 为单通道振动信号故障特征提取不完整而制约故障诊断结果可靠性和准确性提供了新的、有效的解决方法. 文献[8-9]研究了基于全矢谱的高阶统计量特征提取对故障诊断的贡献, 并将其应用于智能故障诊断中, 取得了较好的效果. 文献[10]对时间序列分析在工程中的应用进行了大量的研究, 分析了时间序列模型在振动信

号趋势预测的适用性. 文献[11]将支持向量回归机应用于机械设备状态趋势预测, 给出了具体的算法, 表明支持向量回归机对机械设备的运行状态趋势具有较好的预测能力. 文献[12-13]分别研究支持向量机预测方法在给水泵和风力发电机组中的故障预测中的应用. 文献[14]将支持向量数据描述方法应用于设备故障程度的预测进行了细致深入的研究.

结合全矢谱技术及支持向量回归预测方法两者的优点, 笔者提出了全矢支持向量回归的频谱(FVSVR)预测新方法. 新方法使用全矢谱技术对同源双通道信号进行信息融合, 采用支持向量回归对全矢谱特征参数进行预测, 克服了单通道数据信息不完整的缺点, 保证了训练数据信息的全面性以及预测结果的准确性.

1 FVSVR 频谱预测实现基础

1.1 全矢谱技术

转子的涡动现象是各谐波频率下的组合作用, 各谐波下的涡动轨迹是一椭圆. 定义这些椭圆的长轴长度为振动强度评价的主振矢, 短轴长度为振动强度的副振矢, 转子在各谐波频率下的涡动强度是对故障诊断和识别的基本依据.

设转子同一截面内相互垂直方向同步采集到

收稿日期: 2015-10-19; 修订日期: 2015-11-20

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50675209)

作者简介: 李凌均(1964—), 男, 河南南阳人, 郑州大学副教授, 博士, 主要从事机械故障诊断研究, E-mail: lingjun@zzu.edu.cn.

的两组振动数据序列为 $\{x_n\}$ 、 $\{y_n\}$, 并得到离散的融合复序列 $\{z_n\} = \{x_n\} + j\{y_n\}$, 其中 $j^2 = -1$, 对其作复傅里叶变化得到其频谱 $\{Z_n\}$. 令

$$\begin{cases} R_{lk} = \frac{1}{2N} [|Z_k| + |Z_{N-k}|]; \\ R_{sk} = \frac{1}{2N} [|Z_k| - |Z_{N-k}|]. \end{cases} \quad (1)$$

式中: R_{lk} 为椭圆的长半轴, 表示振动的最大值, 为主振矢; R_{sk} 为椭圆的短半轴, 为副振矢.

1.2 支持向量回归机算法

在线性回归问题中, 对于给定的训练样本 (\mathbf{x}_i, y_i) , $\mathbf{x}_i \in \mathbf{R}^d$, $y_i \in \mathbf{R}$, $i = 1, \dots, n$, 线性回归的目标就是求下列回归函数

$$f(\mathbf{x}) = (\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i) + b. \quad (2)$$

式中: $\mathbf{w} \in \mathbf{R}^n$; $b \in \mathbf{R}$; $(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i)$ 为 \mathbf{w} 与 \mathbf{x}_i 的内积, 并且满足结构风险最小化原理.

对优化目标函数求极值

$$Q(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}(\mathbf{w} \cdot \mathbf{w}) + CR_{\text{emp}}(f). \quad (3)$$

式中: C 为惩罚因子, 是实现在经验风险和置信范围之间的折中; R_{emp} 为损失函数. 常用的损失函数有 Laplace 函数、二次函数、Huber 函数和 ε -不敏感函数, 其中 ε -不敏感函数因具有较好的性质而得到广泛的应用, 定义为

$$L_{\varepsilon}(d, y) = \begin{cases} |d - y| - \varepsilon, & |d - y| > \varepsilon; \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (4)$$

当引入 ε -不敏感函数时, 式(3)可写成

$$Q(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}(\mathbf{w} \cdot \mathbf{w}) + C \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - f(\mathbf{x}_i)|_{\varepsilon}. \quad (5)$$

考虑可能超出精度的拟合误差, 引入松弛因子, 建立 Lagrange 方程, 可求得线性回归函数:

$$f(\mathbf{x}, \alpha_i, \alpha_i^*) = \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}) + b. \quad (6)$$

对于非线性问题, 根据 V. Vapnik 提出的核函数理论^[15], 可以用核函数 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 来替代内积运算, 实现由低维空间到高维空间的映射, 从而使低维空间的非线性问题转化为高维空间的线性问题. 引入核函数后, 相应的回归函数为如下形式:

$$f(\mathbf{x}, \alpha_i, \alpha_i^*) = \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b. \quad (7)$$

常用的核函数有线性核函数、多项式核函数、高斯径向基核函数和指数径向基核函数.

1.3 时间序列预测方法

假设系统的输出采样时间间隔是 τ , 得到的输出时间序列为

$$x(0), x(\tau), \dots, x(i\tau), \dots, x((n-1)\tau). \quad (8)$$

该输出序列也是对未来值进行预测时的输入序列.

由 n 时刻的前 m 个值预测第 n 个值的问题可表示为寻找如下的对应关系 f 的问题:

$$x_n = f(x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_{n-m}). \quad (9)$$

式中: x_i 是 $x(i\tau)$ 的缩写形式, $i = 1, 2, \dots$ 在建立训练回归模型时, 为了更有效地进行预测模型建模, 对其进行空间重构, 即将一维的时间序列转化成矩阵形式获得数据间的关联关系从而挖掘到尽可能多的信息量, 建立滑动时间窗口 $\mathbf{X}_n = \{x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_{n-m}\}$ 与输出 $\mathbf{Y}_n = \{x_n\}$ 之间的映射关系, 重构结果为

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_m \\ x_2 & x_3 & \dots & x_{m+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_k & x_{k+1} & \dots & x_{k+m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_k \end{bmatrix}; \quad (10)$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} x_{m+1} \\ x_{m+1} \\ \vdots \\ x_{m+k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{m+1} \\ y_{m+1} \\ \vdots \\ y_{m+k} \end{bmatrix}. \quad (11)$$

经过训练模型建立完成后, 第1步预测的形式为

$$\hat{x}_{n+1} = f(x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-m+1}). \quad (12)$$

第2步预测的形式为

$$\hat{x}_{n+2} = f(\hat{x}_{n+1}, x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-m+2}). \quad (13)$$

后续的各步预测依此形式类推. 其中, \hat{x}_i 为第 i 点的预测值; x_i 为第 i 点的真实值, $i = 1, 2, \dots$.

1.4 预测精度的评价指标

选用平均相对误差评价指标来评价预测的效果, 平均相对误差反映了预测值与真实值的偏离相对于真实值的大小, 其计算公式为

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{x_i - \hat{x}_i}{x_i} \right| \times 100\%. \quad (14)$$

式中: x_i 代表真实值; \hat{x}_i 代表预测值.

2 全矢支持向量回归

①设在同一个截面上同步采集的两个相互垂直的信号为 $x(t)$ 、 $y(t)$; ②将同源双通道信号 $x(t)$ 、 $y(t)$ 进行全矢谱同源信息融合; ③确定回归步长, 构建训练样本; ④通过支持向量回归对训练样本进行模型训练; ⑤进行预测, 得到预测数据.

全矢支持向量回归的预测流程如图1所示.

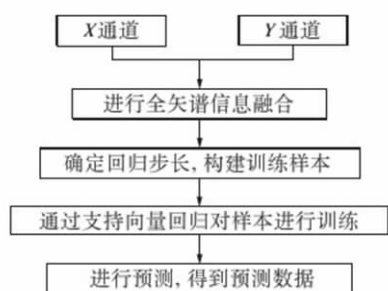


图1 全矢支持向量回归的预测流程

Fig.1 The prediction process of FSVR

3 实验分析及参数讨论

某电厂1000 MW汽轮机结构简图如图2所示.图2中每个滑动轴承处安装互相垂直的一对

电涡流位移传感器来监测转子相对于轴承座的振动,即X和Y振动位移信号.转子转速为3000 r/min,按每周期32个点同步整周期采样(即采样频率为1600 Hz),采样长度为1024点.在长期的监测过程中发现高压转子2#轴承的轴振经常较大,易出现故障.对轴振X及轴振Y进行频谱分析及全矢谱分析,得到轴振X及轴振Y的频谱图及全矢幅值谱图,如图3所示.

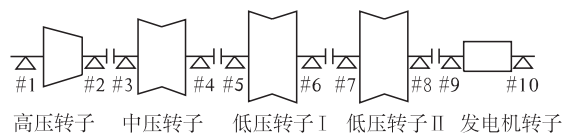


图2 汽轮机结构简图

Fig.2 The structure diagram of steam turbine

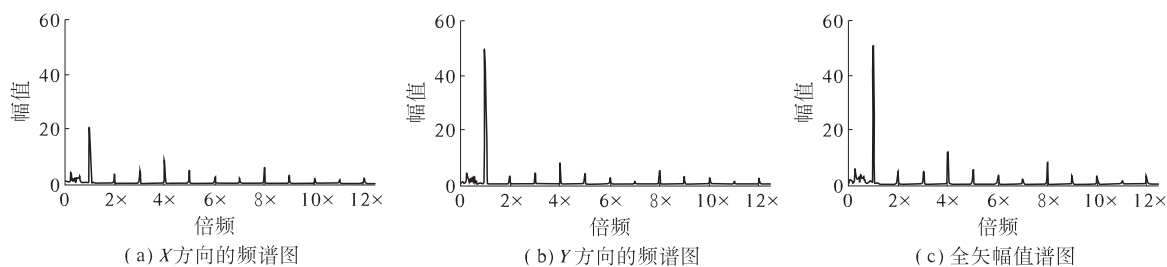


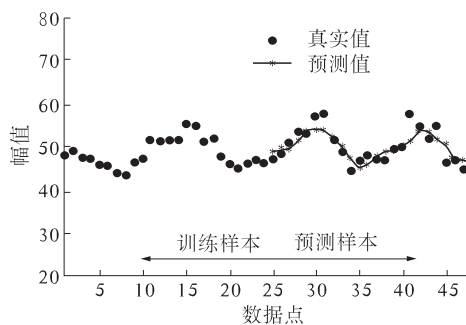
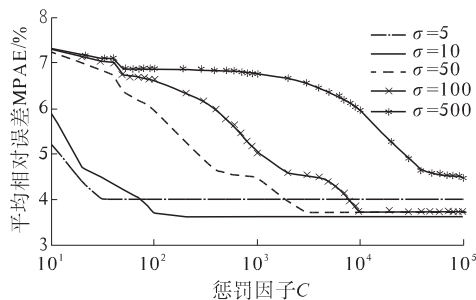
图3 #2轴承振动信号频谱图及全矢谱图

Fig.3 The spectrum and full vector spectrum of the vibration signal of #2 bearing

从图3的对比可以看出,两个方向的频谱结构存在差异.分别对单通道的频谱进行预测,得到的预测结果可能会有不同的结论.而全矢谱保证了各谐波的最大强度,对其进行预测可以保证频谱结构的准确性,其结论也是唯一的.由于主振矢 $1 \times (1 \text{ 倍频})$ 较大,此处对主振矢 $1 \times$ 进行预测.每隔2 h提取一组数据,连续提取48组,对其进行全矢谱信息融合,提取主振矢 $1 \times$ 分量.分别将前24组数据,采用1.3节的数据组织形式构建训练样本,后24组数据作为预测样本.

预测模型的损失函数采用 ε -不敏感函数, $\varepsilon = 1$,惩罚因子 $C = 200$,核函数采用指数径向基核函数,其中宽度系数 $\sigma = 10$,回归步长 $m = 5$.图4显示的是对训练样本后面24个时刻的单步预测结果,相对平均误差为3.61%.

在预测过程中发现,惩罚因子 C 及指数径向基核函数的宽度系数 σ 对预测的影响很大,而 C 及 σ 并没有一个相对确定的值可以使预测效果更好.为了分析不同 C 及 σ 对预测效果的影响,进行大量的对比实验,预测精度的实验结果如图5所示.

图4 主振矢 $1 \times$ 单步预测结果Fig.4 The results of single step prediction of $1 \times$ main vibration vectors图5 惩罚因子 C 及宽度系数 σ 对预测误差的影响Fig.5 The influence on prediction error of C and σ

从图5可以发现,在不同宽度系数 σ 下,相对平均误差随着惩罚因子 C 的增大而降低,当惩罚因子 C 增大到一定程度时,误差趋于稳定.

C 取不同值下的预测结果如图6所示.可以看出,在 C 较小时,预测曲线较为平缓,近似为直线;随着 C 增大,预测曲线的趋势渐渐地向着真实曲线的趋势发展,这就呈现出随着 C 的增大,预测误差随之降低. C 的大小决定了由训练样本产生的经验风险对模型的影响的大小.如果 C 取值过小,会因为未获得大量的训练数据,出现“欠学习”的现象,预测模型也就失去了预测能力;如果 C 取值过大,会出现“过学习”的现象,加大了建立模型的计算量. C 应在能保证预测误差较小的前提下,取较小的值.

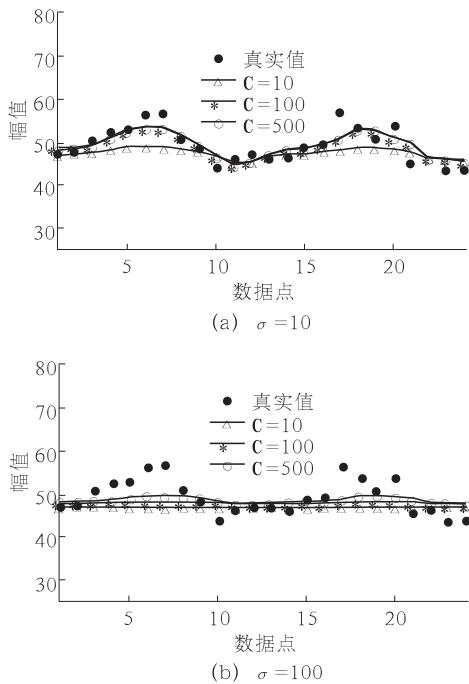


图6 C 取不同值时的预测结果
Fig. 6 The prediction results of different C values

另外,通过图6的对比还可以看出,当 σ 越大时,预测曲线随着 C 的增大,朝着真实曲线趋势变化的速度变得越来越慢,这也就是误差减小的速度越来越慢的原因.当 σ 选很大时, C 需要相当大的值才能提高预测的精度.而 C 增加会使训练的迭代次数增加,降低训练的速度,所以 σ 不宜取的较大.一般情况下,可以对参数进行交叉寻优找到合适的宽度系数 σ 及惩罚因子 C .

不敏感系数 ε 的取值也对模型的预测能力有一定的影响.表1是不同的不敏感系数 ε 下的单步预测平均相对误差.可以看出,本例中不敏感系数 ε 为1时,预测误差最小,这也是本例中不敏感系数 ε 选为1的原因.

表1 ε 取不同值时的预测误差
Tab. 1 The prediction error of different ε values

ε 取值	误差 / %	ε 取值	误差 / %
0.01	3.74	0.70	3.62
0.05	3.73	1.00	3.61
0.10	3.73	1.20	3.65
0.40	3.65	1.50	3.84

支持向量机预测模型中有多种核函数,选用不同核函数对预测效果的影响也有一定的影响.在研究过程中,分别采用了4种核函数进行了对比分析.表2给出了不同核函数的单步预测平均相对误差.其中,损失函数采用 ε -不敏感函数, $\varepsilon = 1$,惩罚因子 $C = 200$,指数径向基核函数宽度系数 $\sigma = 10$,多项式核函数的阶数 $d = 3$,Sigmoid核函数 $b = 10, c = 0$.可以看出,在本样本中,指数径向基核函数预测效果较好.

表2 不同核函数时的预测误差
Tab. 2 The prediction error of different kernel function

核函数	指数径向基	多项式	线性	sigmoid
平均相对误差 / %	3.61	13.54	4.34	6.26

文献[13]中对支持向量回归中训练样本的回归步长 m 进行了研究.研究表明, m 一般不宜过大, m 过大并不能提高回归精度,但却增加了计算量, $m = 3 \sim 5$ 时可得到较好的预测精度,选取回归步长 $m = 5$.

对主振矢 $1 \times$ 进行多步预测(三步预测),预测结果如图7所示.图中每个点都是三步预测结果中第3步的预测值,共22个第3步预测值,相对平均误差为4.22%.预测模型中的参数与单步预测的参数相同,即损失函数采用 ε -不敏感函数, $\varepsilon = 1$,惩罚因子 $C = 200$,核函数采用指数径向基核函数,宽度系数 $\sigma = 10$,回归步长 $m = 5$.可见,该方法对多步预测也有较好的预测效果.

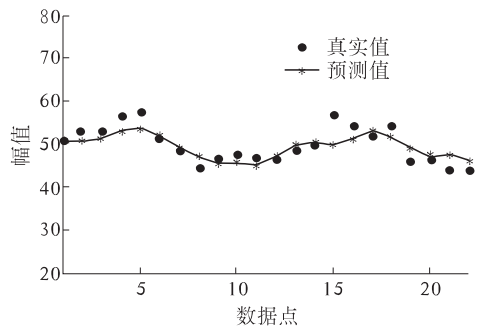


图7 主振矢 $1 \times$ 三步预测结果
Fig. 7 The results of 3 steps prediction of $1 \times$ main vibration vectors

4 结论

为了更深入地研究旋转机械的状态趋势,提出了一种用全矢支持向量回归对旋转机械频谱预测的新方法.新方法使用全矢谱技术对同源双通

道信号进行信息融合,保证了训练数据信息的全面性,避免了对单通道的频谱进行预测得到不全面或不正确的预测结果,并在单步及多步预测中具有较好的预测效果.在工程运用中,采用全矢支持向量回归方法建立的模型对转子振动频谱进行预测,通过预测结果可以对机组未来的情况进行深入全面的分析,判断振动增大的内在原因,尽早对状态不良的机组进行针对性较强的处理措施,避免机组发生意外事故及经济损失,提高了机组运行的安全性,具有较强的工程应用意义.

参考文献:

- [1] 何正嘉,陈进,王太勇,等.机械故障诊断理论及应用[M].北京:高等教育出版社,2010.
- [2] 李巍华,李静,张绍辉.连续隐半马尔科夫模型在轴承性能退化评估中的应用[J].振动工程学报,2014,27(8):613-620.
- [3] 李永耀,韩捷,管腾飞,等.全矢AR-Kalman滤波的机械故障趋势预测方法研究[J].机械设计与制造,2015(1):217-219.
- [4] BOKOSKI P, GAPERIN M, PETELIN D. Bearing fault prognostics based on signal complexity and Gaussian process models [C]//2012 IEEE International Conference on Prognostics and Health Management, Denver, CO, USA; IEEE Press, 2012: 1-8.
- [5] 韩捷,巩晓赞,雷文平.面向旋转机械的虚拟融合检测技术研究[J].振动与冲击,2012,31(s):120-123.
- [6] 韩捷,关惠玲,梁川,等.矢谱:一种实用的旋转机械故障诊断分析方法[J].机械强度,1998,20(3):212-215.
- [7] 韩捷.全矢谱技术及设备故障诊断应用研究[D].上海:同济大学机械学院,2005.
- [8] 李凌均,韩捷,李朋勇,等.基于矢双谱的智能故障诊断方法[J].机械工程学报,2011,47(11):64-68.
- [9] 李凌均,韩捷,李朋勇,等.矢双谱分析及其在机械故障诊断中的应用[J].机械工程学报,2011,47(17):50-54.
- [10] 杨叔子,吴雅,轩建平.时间序列分析的工程应用[M].2版:上,武汉:华中科技大学出版社,2007.
- [11] 李凌均,张周锁,何正嘉.基于支持向量机的机械设备状态趋势预测研究[J].西安交通大学学报,2004,38(3):230-233.
- [12] 叶兆青,卢坤杰,林光营,等.基于支持向量机的给水泵故障预测研究[J].锅炉制造,2014(4):41-45.
- [13] 胡庆春.基于支持向量机和统计过程控制的风电机组故障预测算法的研究[D].北京:华北电力大学机电学院,2011.
- [14] 陈斌,阎兆立,程晓斌.基于DVDD和相对距离的设备故障程度预测[J].仪器仪表学报,2011,32(7):1558-1563.
- [15] VAPNIK V N. The nature of statistical learning theory [M]. New York: Springer, 1995.

The Prediction Method of Frequency Spectrum Based on Full Vector Support Vector Regression

LI Lingjun¹, CHEN Chao^{1,2}, HAN Jie¹, CHEN Hong¹

(1. Research Institute of Vibration Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China; 2. Henan Mechanical and Electrical Vocational College, Zhengzhou 451191, China)

Abstract: In order to predict the fault type and the fault position of rotating machinery more accurately, a new prediction method of frequency spectrum based on full vector support vector regression is proposed. The new method uses the full vector spectrum technology to merge the homologous double channel signal information, and uses support vector regression to predict the full vector spectrum characteristic parameters, which can ensure the comprehensiveness of the training data and the accuracy of predict result. This method can forecast the frequency spectrum of the vibration signal accuracy and can then give the technical based for fault type and fault position predict. The experimental results of the frequency spectrum forecast of a 1000 MW steam turbine shaft show that this method can predict fully and accurately the spectrum's structure of vibration signal.

Key words: full vector spectrum; support vector regression; time series; frequency spectrum prediction

基于 LMS 的怠速状态方向盘振动试验研究

王若平, 黄 杰

(江苏大学 汽车与交通工程学院, 江苏 镇江 212013)

摘 要: 对某车型轿车进行整车 NVH 性能主观评价时发现, 经过悬置调校后, 怠速空调工况下方向盘振动仍过大, 影响整车的舒适性. 针对此问题, 采用 LMS TEST. Lab 设备对怠速方向盘振动进行测试, 初步判断为冷却风扇基频对方向盘抖动有较大影响. 运用试验模态分析理论和方法分别对激励源、主要传递路径和响应点进行分析, 发现该车冷却模块(CRFM)和方向盘模态参数与冷却风扇基频相一致. 试验结果表明: 结合整车实际情况, 通过改善减振垫结构及调节冷却风扇转速的优化, 可使方向盘抖动明显降低.

关键词: 方向盘; 振动; LMS; 冷却风扇; 模态分析

中图分类号: U463.1 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.019

0 引言

方向盘是驾驶员操控的部件, 其振动过大易使驾驶员产生疲劳, 对整车舒适性也有不利影响. 为了解决怠速时方向盘抖动的问题, 许多学者对其展开了大量研究. 姚运仕等^[1]等通过改变双冷却风扇的转速差, 破坏形成“拍振”的条件, 解决了怠速时方向盘抖动问题; 郭文洋等^[2]等调整冷却风扇静不平衡值和改变其隔振垫的 Z 向刚度和硬度值, 使怠速时方向盘振动得到抑制; Bianchini^[3]将一套主动控制系统安装在转向柱上, 用以消除怠速转向盘振动; Kim 等^[4]研究转向支架及转向柱刚度避开怠速共振频率, 来缓解振动.

笔者针对怠速开空调工况方向盘振动偏大的问题, 利用试验模态分析理论和方法分别对激励源、主要传递路径及响应点进行分析, 找出根源所在, 并对方向盘抖动加以抑制, 为解决类似工程问题提供了一种有效方法.

1 试验模态分析理论和方法

具有弹簧-阻尼-质量的单、多自由度振动系统受到外界激励的作用, 根据牛顿第二定律, 其一般微分方程为:

$$[m]\{\ddot{x}\} + [c]\{\dot{x}\} + [k]\{x\} = \{f\}. \quad (1)$$

式中: $[m]$ 、 $[c]$ 、 $[k]$ 分别为质量、阻尼、刚度矩阵; $\{\ddot{x}\}$ 、 $\{\dot{x}\}$ 、 $\{x\}$ 分别为系统的加速度、速度、位移向量; $\{f\}$ 为作用在系统上的激励向量.

引入 $\{x\} = [\Phi]\{q\}$, $[\Phi]$ 、 $\{q\}$ 分别为模态矩阵和模态坐标, 上式可变换为模态解耦方程:

$$\{\ddot{q}\} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 2\zeta\omega_n & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \{\dot{q}\} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \omega_n^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \{q\} = [\Phi]^T \{f\}. \quad (2)$$

其中, 第 r 阶模态方程为:

$$(K_r - \omega^2 M_r + j\omega C_r) q_r = F_r. \quad (3)$$

式中, $F_r = [\Phi]^T \{f\}$, M_r 、 K_r 、 C_r 分别为模态质量、刚度和阻尼.

由式(3)得

$$q_r = \frac{F_r}{K_r - \omega^2 M_r + j\omega C_r}. \quad (4)$$

结构上某点 l 的响应为

$$x_l(\omega) = \sum_{r=1}^N \phi_{lr} q_r. \quad (5)$$

假设激励力 $f_p(\omega)$ 位于 p 点, 模态力则为

$$F_r = \phi_{pr} f_p(\omega). \quad (6)$$

将式(6)代入式(4)中, 得

$$q_r = \frac{\phi_{pr} f_p(\omega)}{K_r - \omega^2 M_r + j\omega C_r}. \quad (7)$$

收稿日期: 2015-09-22; 修订日期: 2015-11-29

基金项目: 江苏省高校自然科学基金项目(14KJB58003).

通信作者: 王若平(1960—), 女, 黑龙江哈尔滨人, 江苏大学副教授, 主要从事现代汽车设计理论与方法的研究,

E-mail: 339077472@qq.com.

将式(7)代入式(5)中得:

$$x_l(w) = \sum_{r=1}^N \frac{\phi_{lr}\phi_{pr}f_p(w)}{K_r - w^2M_r + jwC_r}. \quad (8)$$

则点 l 与激励力点 p 之间的频响函数(FRF)为:

$$H_{lp}(w) = \frac{x_l(w)}{f_p(w)} = \sum_{r=1}^N \frac{\phi_{lr}\phi_{pr}}{K_r - w^2M_r + jwC_r}. \quad (9)$$

经化简,得

$$H_{lp}(w) = \sum_{r=1}^N \frac{\phi_{lr}\phi_{pr}}{M_r [(w_r^2 - w^2) + 2j\varepsilon_r w_r w]}. \quad (10)$$

其中, $\varepsilon_r = \frac{C_r}{2M_rw_r}$, $w_r^2 = \frac{K_r}{M_r}$, w_r 、 ε_r 分别为模态第 r 阶的固有频率和临界阻尼比^[5].

试验模态分析方法: 使用试验测试设备, 采集结构件上某些测点的动态输出和输入数据, 将其转化为频率响应函数 FRF 矩阵, 然后经过模态参数的识别就能得到系统的模态参数 w_r 、 ε_r 和振型 ϕ_r .

2 怠速方向盘振动试验与分析

影响汽车怠速开空调时方向盘振动的主要因素有: 发动机振动、冷却模块(CRFM)系统引起的振动——风扇振动和空调压缩机振动、减振垫对 CRFM 振动的衰减效果等^[6]. 为了判断各影响因素对方向盘振动的影响程度进行如下试验.

采用 LMS TEST. Lab 设备中的 Signature 模块, 分别在实车怠速关空调(默认风扇不运转)和怠速开空调工况下, 对方向盘 12 点方向进行测试. 测试坐标定义为整车坐标, 振动传感器布置如图 1. 该车怠速方向盘振加速度均方根值见表 1, 振动加速度频谱图见图 2.



图 1 方向盘上振动传感器测点布置

Fig. 1 Position of acceleration sensor on the steering wheel

从表 1 可见, 怠速关空调工况, 方向盘 3 个方向振动值均小于 0.2 m/s^2 , 方向盘振动影响较小;

怠速开空调工况时, 方向盘 3 个方向中 X 、 Y 向振动都超过 0.6 m/s^2 , 特别是 X 向振动为 1.29 m/s^2 , 主观感觉较差, 这会对驾驶员有较大的负面影响, 需要加以抑制.

表 1 方向盘振动加速度均方根值

Tab. 1 The vibration acceleration RMS of steering wheel

测试工况	方向盘 12 点振动/($\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$)		
	X	Y	Z
怠速关空调	0.19	0.11	0.14
怠速开空调	1.29	0.65	0.27

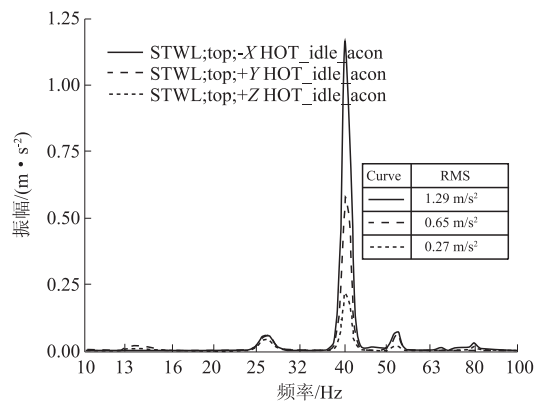


图 2 怠速开空调工况方向盘振动频谱图

Fig. 2 The idle vibration frequency response of steering wheel with AC ON

由图 2 可知, 怠速开空调工况, 发动机点火阶次频率特征明显, 峰值频率分别对应发动机二阶点火频率及其倍频. 发动机二阶点火基频约为 26.7 Hz , 对应发动机转速 800 r/min , 冷却风扇转速为 2400 r/min , 对应频谱图中的 40 Hz . 振动频谱中冷却风扇转动基频的幅值远高于发动机二阶点火频率的幅值, 二者相差 10 倍以上. 因此, 可以判断冷却风扇振动基频对方向盘抖动有较大影响.

3 “源—路径—响应点”分析

3.1 激励源

虽然冷却风扇有严格的动不平衡限值, 但由于制造、安装等因素的影响仍不可避免地存在微小的动不平衡量, 高速转动时形成激励源, 引起车辆的振动和噪声^[7-8]. 当动不平衡量不符合要求时, 将引起风扇本体振动过大, 从而导致驾驶室内方向盘振动过大. 检查供应商提供的产品报告, 结果显示, 该车冷却风扇的动不平衡量为 $15 \text{ g} \cdot \text{mm}$, 在目标值 ($30 \text{ g} \cdot \text{mm}$) 以内, 符合要求.

3.2 传递路径分析

冷却风扇到方向盘的主要传递路径: 冷却风扇产生的振动经减振垫后传递到车身纵梁, 然后传递到转向管柱引起方向盘振动。

3.2.1 冷却模块刚体模态试验

冷却模块由冷凝器、散热器和冷却风扇等组成。其刚体模态的模态参数, 不是由结构本身的动力特性求得的, 而是由结构的边界条件(支承刚度和阻尼) 决定的。影响刚体模态的因素包括刚体四周的支承元件刚度和阻尼特性, 以及刚体本身的质量等等, 因此, 减振垫对 CRFM 刚体模态有较大影响。

采用 LMS TEST. Lab 中的 Impact testing 模块对该车实车状态下的 CRFM 进行测试。试验时对冷却风扇进行单点激励, 激励力由力锤锤击产生, 激励力方向为 X、Y、Z 3 个方向, 为了更好激起 6 个方向的模态值, 进行多点激振。并利用 Modal Analysis 模块进行后处理, 得到各测点的传递函数、相干函数及功率谱图, 经综合分析得出各方向的模态值见表 2, R_z 方向振型图如图 3。

表 2 CRFM6 个方向的振动频率及振型
Tab.2 Six direction modal frequency and shapes of CRFM

频率 f /Hz	阻尼比 /%	振型描述
19.2	3.48	纵向平动/ T_x
27.0	4.33	侧向平动/ T_y
27.2	4.22	垂向平动/ T_z
32.7	2.40	绕纵向侧倾/ R_x
54.8	4.14	绕侧向俯仰/ R_y
40.9	5.26	绕垂向横摆/ R_z

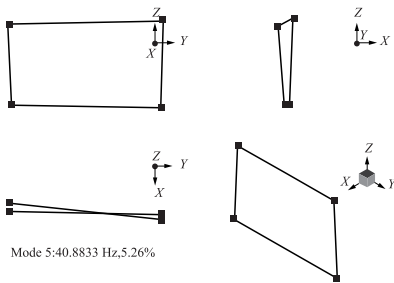


图 3 CRFM 的 R_z 方向的固有频率振型图
Fig.3 R_z direction Modal frequency and shapes of CRFM

由表 2 可见, T_x 、 T_y 、 T_z 3 个方向的振动频率均小于冷却风扇激振基频(40 Hz) 的 $\sqrt{2}/2$ 倍, 其中 T_y 、 T_z 2 个方向的振动频率 27.0 Hz、27.2 Hz 与怠速开空调发动机二阶点火频率(26.7 Hz) 耦合, 满足动力吸振器^[9] 的频段设计要求, 以吸收怠速时发动机的振动能量。 R_x 、 R_y 方向振动

频率分别为 32.7 Hz、54.8 Hz, 避开了冷却风扇基频; R_z 方向的振动频率为 40.8 Hz, 与风扇基频耦合, 减振垫该方向衰减振动的能力较差, 是导致方向盘抖动的原因之一。

3.2.2 车身模态试验

采用 LMS TEST. Lab 设备对整车进行模态测试, 激励力由激振器产生, 其前 5 阶模态见表 3。

表 3 车身前 5 阶振动频率及振型
Tab.3 The first five order modal frequency and shapes of vehicle

模态阶次	频率/Hz	阻尼比 /%	振型描述
1	25.2	0.30	顶棚一阶弯曲
2	30.4	1.84	整车一阶扭转
3	34.5	1.32	顶棚二阶弯曲
4	35.1	2.72	整车一阶弯曲
5	50.9	1.21	前端横摆

由表 3 可见, 车身前 5 阶模态避开发动机点火频率及其倍频和冷却风扇基频, 基本排除车身共振的可能。

3.3 方向盘模态试验

静止状态下, 采用 LMS TEST. Lab 设备, 对实车方向盘约束状态下进行模态试验, 其模态频率可通过频率响应函数分析方法(FRF) 获得。

图 4 所示为通过锤击法测得的方向盘上测点的频响函数曲线, 其中, 激励点和响应点均为方向盘 12 点方向。由图 4 中可知, 实车约束状态下方向盘刚度较之自由状态发生了显著变化, 从而产生了大约为 40 Hz 和 42 Hz 的两阶模态。怠速开空调工况时的风扇转动基频为 40 Hz, 正好与方向盘约束状态参数耦合, 也是导致方向盘抖动的主要原因之一。

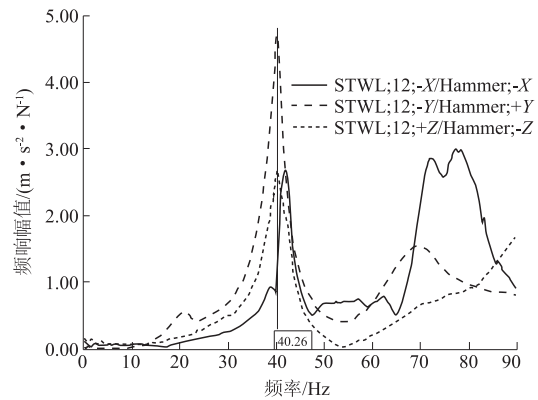


图 4 方向盘上测点频响函数幅频特性
Fig.4 The FRF of test point on the steering wheel

从上面分析可以看出, 影响方向盘抖动的主

要因素有二:一是 CRFM 的 R_z 向振动频率与风扇基频耦合,减振垫该方向的衰减振动能力较差;二是风扇激励力频率与方向盘模态参数耦合。

4 方向盘振动控制及试验验证

(1) 改变减振垫的结构,衰减更多的振动能力,降低方向盘振动。由于 CRFM 的 R_z 向的振动频率与冷却风扇基频耦合,且整个总成质量主要压在下减振垫上,笔者只针对下减振垫 X 、 Y 方向进行优化。结构调整后,改变其受力面积及受力方式,使 X 、 Y 向刚度增加。优化前后减振垫结构如图 5 所示。

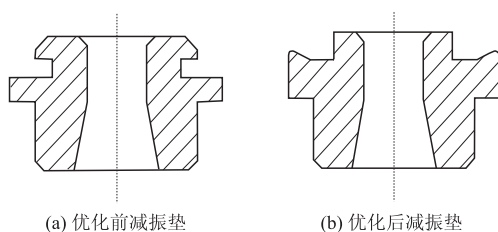


图 5 优化前后减振垫结构对比

Fig. 5 Comparison of the isolator's construction before and after optimization

采用 LMS TEST. Lab 设备,分别测试减振垫优化后的 CRFM 刚体模态和怠速方向盘振动加速度。优化前后 CRFM 的 X 向 FRF 对比如图 6 所示,方向盘振动加速度如表 4 所示。

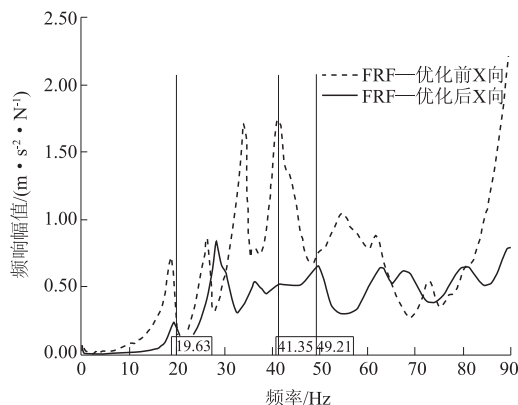


图 6 减振垫优化前后 CRFM 的 X 向频响函数幅频特性对比

Fig. 6 Comparison of the X -FRF of CRFM before and after isolator optimization

表 4 减振垫优化后方向盘振动加速度均方根值
Tab. 4 The vibration acceleration RMS of steering wheel after isolator optimization

测试工况	方向盘 12 点振动/($\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$)		
	X	Y	Z
怠速关空调	0.16	0.09	0.10
怠速开空调	0.77	0.28	0.18

由图 6 可知,优化后 R_z 方向的振动频率提高到 49.2 Hz,避开了冷却风扇基频频率,且该频率下幅值变化较明显; T_x 方向的振动频率增加 1 Hz 左右,也满足隔振的要求。

由表 4 可见,优化后,方向盘 3 个方向振动均减小, X 向振动减小到 0.77 m/s^2 , Y 向振动减小到 0.28 m/s^2 ,主观评价不能接受,还需继续优化。

(2) 在满足发动机散热要求基础上,改变冷却风扇的转速,避免其基频频率和方向盘模态参数耦合,同时也避开与 CRFM、车身等主要模态参数耦合。改变转速后,冷却风扇高低转速分别为 2 200 r/min 和 1 950 r/min。采用 LMS TEST. Lab 设备,测试改变转速后怠速开空调方向盘振动加速度,测试结果如图 7 所示。

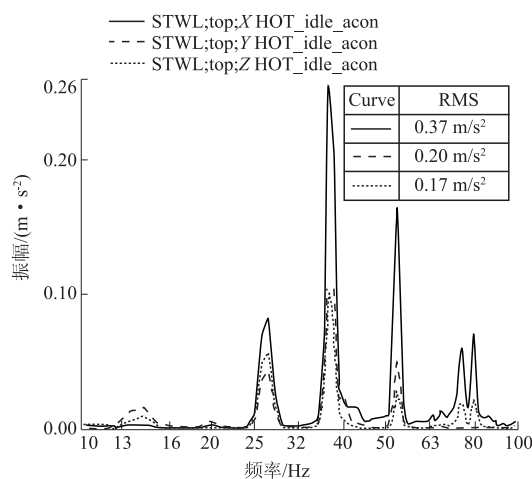


图 7 改变风扇转速怠速开空调工况下方向盘振动频谱图
Fig. 7 The idle vibration frequency response of steering wheel with AC ON after regulating the rotate speed of cooling fan

由图 7 可知,改变转速后冷却风扇基频能量明显降低,与发动机二阶点火频率能量相差不大;方向盘 3 个方向加速度也明显降低,特别是 X 向由最初的 1.29 m/s^2 降到 0.37 m/s^2 ,主观感觉能够接受,方向盘抖动问题得到明显改善。

5 结论

(1) 针对影响汽车怠速开空调时方向盘振动的主要因素,进行振动测试。通过振动频谱图分析判断出冷却风扇基频对方向盘抖动有较大影响,再利用“源—路径—响应点”的思路,可知方向盘振动偏大的主要原因是:① CRFM 的 R_z 向模态频率与冷却风扇基频频率耦合,导致减振垫该方向对 CRFM 振动衰减能力较差;② 整车方向盘模态参数与冷却风扇基频频率耦合。

(2) 原结构减振垫 X 、 Y 向刚度稍偏低,为此,改变其受力面积和受力方式,提高 X 、 Y 向刚度值,优化后方向盘振动减小,但主观评价仍不可接受;且由于抖动原因主要与冷却风扇基频有关,故而调整其转速后,方向盘抖动得到有效的抑制。

参考文献:

- [1] 姚运仕,冯忠绪,马芳武,等. 冷却风扇“拍振”对转

- 方向盘抖动影响的研究[J]. 广西大学学报(自然科学版), 2011, 36(2): 211-215.
- [2] 郭文洋, 蔡操平. 怠速状态开空调致方向盘振动大的问题研究[C]//2013 中国汽车工程学会年会论文集. 北京: 中国汽车工程学会, 2013: 1275-1277.
- [3] BIANCHINI E. Active vibration control of automotive steering wheels [C]//SAE Paper, 2005-01-2546. Michigan: The Engineering Meeting Board, 2005: 200-210.
- [4] KIM K C, CHOI I, KIM C M. A study on the advanced technology analysis process of steering system for idle performance [C]//SAE Paper, 2007-01-2339. Illinois: International Journal of Automotive Technology, 2007.
- [5] 庞剑, 谌刚, 何华. 汽车噪声与振动-理论与应用[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 2006.
- [6] 杨骥, 郝志勇, 葛如炜, 等. 发动机冷却模块振动优化[J]. 浙江大学学报(工学版), 2012, 46(12): 2194-2200.
- [7] 姚运仕, 冯忠绪, 马芳武, 等. 冷却风扇“拍振”影响车内噪声的实验研究[J]. 郑州大学学报(工学版), 2013, 34(4): 40-44.
- [8] 郑福林, 王学军, 王若云, 等. 由动不平衡引起的拍频振动的识别与控制[J]. 汽车技术, 2007, (5): 23-25.
- [9] 王铁, 上官文泷, 刘晓昂, 等. 汽车冷凝器-散热器-风扇总成悬置系统的设计方法[J]. 汽车工程, 2015, 37(2): 155-159.

Test Investigation on the Vibration of Steering Wheel under Idling Based on LMS

WANG Ruoping, HUANG Jie

(School of Automotive and Traffic Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

Abstract: In the process of NVH subjective evaluation of a car, after the calibration of the mount system, the vibration of the steering wheel was found to be still overlarge under the idle condition when the air conditioning (AC) was switched on, which severely affected the cosiness of the vehicle. The idle vibration test of steering wheel with LMS TEST. Lab was done to solve the problem. The conclusion is that the rotating speed frequency of the cooling fan had a great impact on the steering wheel vibration. By using experimental modal analysis theory and method to search the excitation source, the main transfer path and the response points, it was observed that modal parameter of condenser-radiator-fan module (CRFM) and steering wheel were identical with cooling fan's rotation frequency. In view of the actual situation of the vehicle, then, the isolator's construction and cooling fan's rotation were adjusted. The test results showed that the shake of steering wheel was decreased obviously after the optimization.

Key words: steering wheel; vibration; LMS; cooling fan; modal analysis

针-网式离子风发生器的散热研究

王 静, 蔡忆昔, 包伟伟, 李慧霞

(江苏大学 汽车与交通工程学院, 江苏 镇江 212013)

摘 要: 基于电晕放电原理, 设计了一种“针-网”结构的离子风发生器, 成功实现了离子风的激发, 并用于大功率 LED 芯片散热. 通过实验研究了放电间距、电压极性、电极布置形式不同时, 发生器的电学特性变化及其对大功率 LED 芯片散热性能的影响, 并比较了离子风发生器与风扇的散热效果. 结果表明: 相同条件下负电晕放电时的散热性能要优于正电晕放电, 放电间距较小时, 芯片引脚温度更低; 1×11 阵列形式对应的散热效果最好, 当放电功率超过 2 W 时, 芯片引脚最低温度为 52.3 °C; 离子风发生器能实现与风扇较为接近的散热效果, 适用于大功率 LED 芯片的散热.

关键词: 电晕放电; 离子风; 大功率 LED; 强化传热; 结温

中图分类号: U463.65+1; O539 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.020

0 引言

近年来, 电晕放电在除尘、灭菌、干燥、材料表面改性、散热和气体流动控制等方面都有广泛的应用, 成为了研究热点^[1-3]. 离子风产生于不均匀电场的电晕放电过程中. 通常, 在相对曲率半径较小的电极附近, 由于电子雪崩引起高速离子射流运动, 离子射流对周围流体产生强烈的扰动, 引发了由曲率半径较小电极向曲率半径较大电极间的气体流动, 这就是离子风产生的原理^[4-8]. 利用离子风进行强化散热, 具有能耗低、无运动部件、可集成度高等优点. 李庆等^[9]采用实验分析和数值模拟相结合的方法建立了放电电压与离子风速之间的关系, 分析了放电空间的流体分布状态. Huang 等^[10]设计了 4 种结构的“针-板”式离子风发生器, 并通过实验研究了传热系数、电晕电流及传热强化因子的变化规律. 赵鑫等^[11]建立了“线-板”式离子风发生器的二维数值模型, 并研究了放电空间内的流场和温度场分布.

笔者基于电晕放电原理, 设计了一种可在大气压环境下稳定工作的、具有电极不对称结构的“针-网”式离子风发生器, 用于大功率 LED 芯片散热, 并通过实验分析离子风发生器的电学特性, 测试不同条件下的温度变化并作定量分析.

1 离子风散热系统

图 1 所示为研究中设计的离子风散热系统, 主要由“针-网”式离子风发生器、热沉和大功率 LED 芯片三部分组成. 离子发生器的高压电极为针状电极, 电极材质为钨钢, 接地极为不锈钢网状电极. 实验时, 放电产生的离子风流经热沉, 把散热翅片传导过来的热量带走, 以实现散热降温的目的. 产生离子风的驱动力越大, 离子风速度越高, LED 芯片散热效果越显著, 其关系可由公式 (1) 说明^[12-13]:

$$\frac{1}{2}\rho |v|^2 = F_e = \int q_e E dV. \quad (1)$$

式中: ρ 为流体密度; v 为离子风速度; F_e 为产生离子风的驱动力; q_e 为电荷密度; E 为电场强度.

2 测试系统及误差分析

选用 PHILIPS LUXEON Altilon 系列大功率 LED 芯片, 型号为 LAFL-C4S-0850, 作为实验光源. 实验系统连接如图 2 所示. 实验所使用的仪器有: TC-4080 型直流高压电源, 最大可输出 ± 20 kV 高压; WYJ-20A60V 型双路直流稳压电源, 用于为 LED 芯片供电; 恒温箱, 精度为 ± 0.1 °C, 用于模拟环境温度的变化; DL-700C 红

收稿日期: 2015-10-25; 修订日期: 2015-12-18

基金项目: 江苏大学高级人才科研启动基金资助项目(5503000025)

通信作者: 王静(1982—), 男, 江苏泰兴人, 江苏大学讲师, 博士, 主要从事 LED 汽车灯具散热研究, E-mail: jacky-wang03@163.com.

外热像仪,测温范围 $-20 \sim 220\text{ }^{\circ}\text{C}$,测温精度 $\pm 2\text{ }^{\circ}\text{C}$; ZJ-16A 多路温度巡检仪,精度为 $\pm 0.1\text{ }^{\circ}\text{C}$,采用 T 型热电偶进行温度采集,可以与计算机之间进行串口 RS485 通讯,温度值可自动存储。

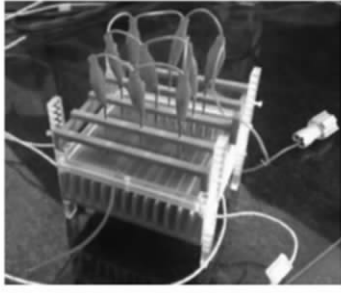


图1 离子风散热系统结构

Fig.1 Ionic wind heat dissipation system

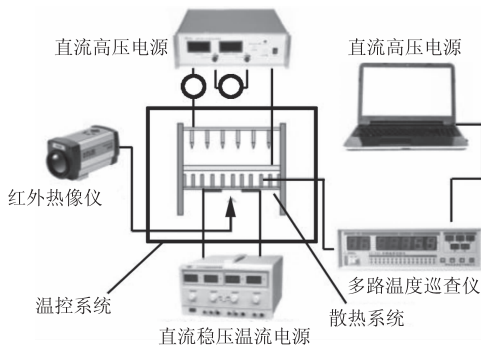


图2 实验系统布置图

Fig.2 Schematic of test system

图3所示为LED芯片及测温点布置,LED芯片通过螺栓固定于热沉表面,接触面涂覆导热硅胶。根据 PHILIPS LUXEON Altilon 系列芯片技术说明,采用热电偶测量 LED 芯片引脚温度,选取 T_{c1} 、 T_{c2} 、 T_{c3} 、 T_{c4} 中最大值作为芯片引脚温度 T_c 。

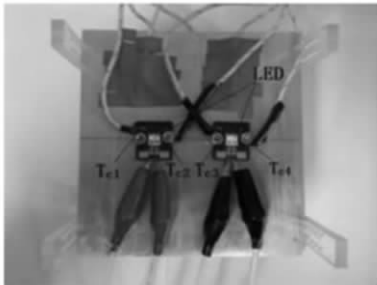


图3 热电偶测温点布置

Fig.3 Test point arrangement of thermocouples

分析图2所示的实验系统可知,温度测试误差主要来源于热电偶的测量误差、温度巡检仪的显示误差以及测试过程中的随机误差。

T 型热电偶的精确度为 0.2 级,测量范围为

$-50 \sim 400\text{ }^{\circ}\text{C}$,因此,最大绝对误差为

$$\delta_1 = \pm (450 \times 0.2\%) \text{ }^{\circ}\text{C} = \pm 0.9 \text{ }^{\circ}\text{C}. \quad (2)$$

ZJ-16A 型多路温度巡检仪的仪表显示误差为

$$\delta_2 = \pm 0.5 \text{ }^{\circ}\text{C}. \quad (3)$$

为研究温度测试过程中的随机误差,对 $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ 的温度进行 20 次重复测量,得到样本标准偏差为 $S = 0.012\text{ }^{\circ}\text{C}$. 因此,根据随机误差与标准偏差的关系,可得

$$\delta_3 = \pm 3S = 0.036\text{ }^{\circ}\text{C}. \quad (4)$$

所以,该实验系统的温度测试误差极限值为

$$\Delta = \delta_1 + \delta_2 + \delta_3 = \pm 1.436\text{ }^{\circ}\text{C}. \quad (5)$$

3 实验结果与分析

根据产生电晕的电源性质,电晕放电可分为直流电晕和交流电晕,其中直流电晕又可分为正电晕和负电晕.当曲率半径较小的电极为正电位,发生的直流电晕称为正电晕,反之称为负电晕。

前期笔者的研究工作中比较了正、负电晕放电现象,探讨了放电间距对启动电压、场强以及系统散热性能的作用规律^[16].在此基础上笔者深入分析了电极布置形式对系统散热性能的影响,对比了离子风发生器与冷却风扇的散热性能。

3.1 电晕放电现象

图4为实验中的正、负电晕放电现象.在电晕放电初始阶段,正电晕放电与负电晕放电均在针电极尖端产生蓝紫色点状光晕,并伴随有细微的电晕气流.但随着电压的逐渐升高,负高压光晕逐渐转变为点状光斑,气流速度逐渐增加,但整个过程较为均匀稳定;而正高压点状光晕则逐渐发展为从针尖指向网状接地极的枝状电晕,亮度增加,最终变为圆锥状光晕,气体流速也逐渐增大,并且伴有明显的“嘶嘶”声,电晕声也会随着电压升高逐渐变大。

笔者前期的研究结果表明^[16]: ①启动电压的高低在一定程度上决定了电晕放电装置产生离子风的难易程度并且不同的电极结构以及负载,对应着不同的启动电压.启动电压随放电间距的增加而升高,对应的电场强度则随着放电间距的增加而减小;且放电间距较小时,场强变化幅度较大,而随着放电间距的增加,场强的变化幅度逐渐减小;此外,负电晕的启动电压低于正电晕. ②放电初始阶段,不同放电间距下的芯片引脚温度随着放电电压的升高而有小幅上升;随着放电电压进一步加大,引脚温度迅速降低并最终趋于稳定.相同条件下负电晕放电时的散热性能要优于正电晕放电.采用负电晕放电,放电电压为 10 kV 时,LED 芯片引脚温度最低为 $64.7\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。



图4 电晕放电现象

Fig. 4 Photos of corona discharge

3.2 电极布置形式对散热性能的影响

研究中的离子风发生器针状电极分别采用 4×4 、 3×7 、 3×11 、 1×11 阵列结构,如图5所示.

环境温度为 25°C ,放电间距为 5 mm ,不同电极布置形式下,LED芯片引脚温度随放电功率的

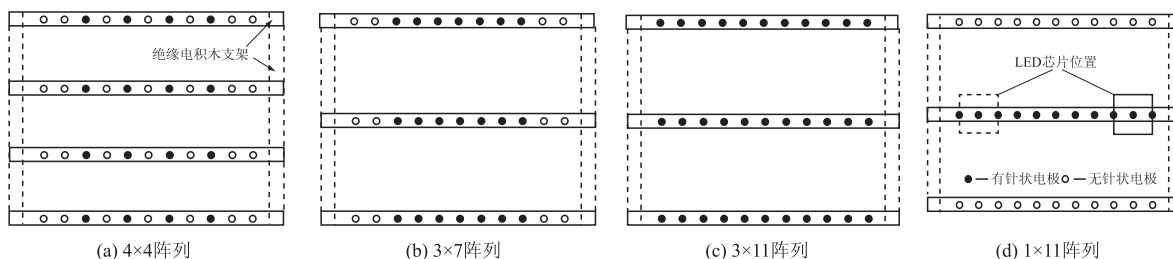


图5 离子风发生器针状电极布置

Fig. 5 Arrangements of needle electrodes

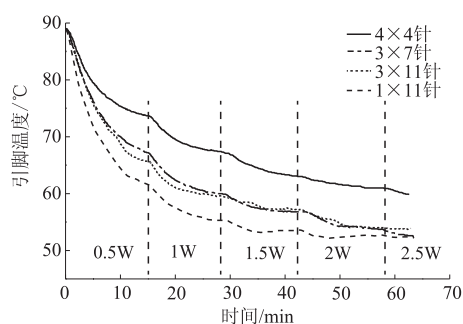


图6 引脚温度的变化

Fig. 6 Case temperature change

3.3 离子风与风扇散热性能比较

定义自然对流状态下芯片引脚温度与施加电晕或开启风扇之后引脚温度的差值为温降,其数值越大,系统散热性能越好.环境温度为 25°C ,放电间距分别为 5 mm 、 10 mm 和 15 mm ,针状电极采用如图5(d)所示的 1×11 阵列形式,图7所示为分别采用离子风发生器和风扇散热时,温降随输入功率的变化关系.由图7可见,离子风发生器

变化如图6所示.由图6可见,高压电极布置形式不同时,系统的散热性能存在着较大差异,其中 1×11 阵列形式对应的散热效果最好, 4×4 阵列形式对应的散热效果最差.这是因为LED芯片可近似看作面状发热源,当针状电极布置在芯片周围(1×11 阵列形式)时,产生的离子风能更有效地对其进行冷却.因此,后续研究中,应对发生器结构进行改进,将针状电极尽可能布置于LED芯片四周.

图6结果显示:离子风发生器未工作时,芯片引脚温度最高为 89°C ,随着放电功率增加,引脚温度迅速下降;当放电功率超过 2 W 时,温度下降趋于平稳, 1×11 阵列形式下的芯片引脚最低温度为 52.3°C .这是因为,随着放电功率的增加,产生的电晕电流也逐渐增大,使得电极之间的离子风速度变大,强制对流加剧,散热性能得到强化;但随着电晕功率的进一步增加,电晕电流也继续增大,当电流到达一定程度之后,会逐步产生焦耳发热的现象,放电时产生的焦耳热导致系统散热效率下降,散热效果变差.

和风扇均可较大幅度地降低芯片引脚温度,随着放电间距的增加,离子风发生器的散热性能降低.输入功率为 2 W ,放电间距为 5 mm 时,两种散热方式下测得的引脚温度分别为 49.9°C 和 45°C ;但随着输入功率的增加,两者的变化趋势略有不同.随着功率增加,若使用风扇散热,温降先增加后降低并趋于平缓;若使用离子风散热,温降不断增加并趋于平缓.

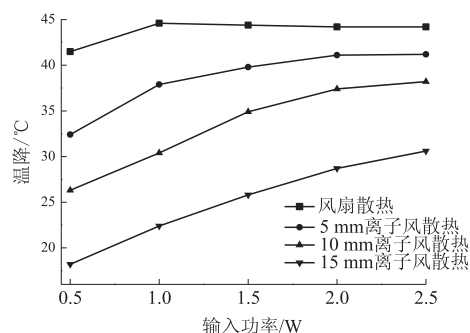


图7 散热性能对比

Fig. 7 Comparison of cooling performance

测得 LED 芯片引脚温度后,其结温可根据公式(6)进行计算:

$$T_j = T_c + IU\eta R_{th,j-c}. \quad (6)$$

式中: I 和 U 分别为芯片的正向驱动电流和正向驱动电压; η 为芯片的致热效率,假定为 0.8; $R_{th,j-c}$ 为芯片结点到引脚的热阻,芯片产品说明书中给出 $R_{th,j-c} = 1.5 \text{ } ^\circ\text{C/W}$.

据此,可计算出输入功率为 2 W 时,分别采用离子风发生器(放电间距为 5mm)和风扇散热时的芯片结温为 65.2 $^\circ\text{C}$ 和 59.3 $^\circ\text{C}$,此时,两种方式下的散热效果较为接近,这与图 8 中红外热像仪测量的芯片结温 64.3 $^\circ\text{C}$ 和 58.5 $^\circ\text{C}$ 基本一致.

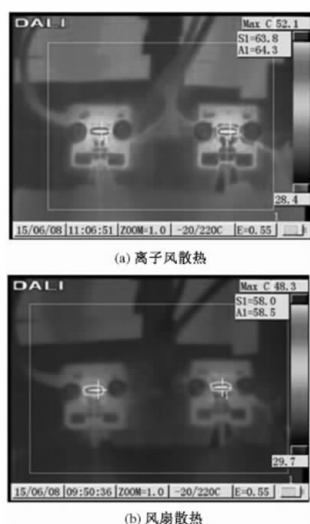


图 8 红外热像仪测得的芯片温度分布

Fig.8 Temperature distribution under thermal infrared imager

4 结论

设计了一种“针-网”式的电晕放电离子风发生器,通过实验对其散热性能进行了定量研究.

(1) 高压电极布置形式不同时,系统的散热性能存在着较大差异,其中 1×11 阵列形式对应的散热效果最好;随着放电功率增加,引脚温度迅速下降;当放电功率超过 2 W 时,温度下降趋于平稳,芯片引脚最低温度为 52.3 $^\circ\text{C}$.

(2) 随着放电间距的增加,离子风散热系统的散热性能降低;放电间距为 5 mm 时,离子风发生器能实现与风扇较为接近的散热效果;采用计算法得到的 LED 芯片结温与红外热像仪测得的结温之间的误差较小.

参考文献:

- [1] KIM J W, PULIGUNDLA P, MOK C. Microbial decontamination of dried laver using corona discharge plasma jet (CDPJ) [J]. Journal of Food Engineering, 2015(161): 24–32.
- [2] 李庆,王巧艳,孟姜山,等. 高压静电除尘器中的离子风与除尘[J]. 河北大学学报(自然科学版), 2012,32(5): 556–559.
- [3] 杨树,张零零,宓东,等. 多针对板电晕放电电离区微观特性分析[J]. 高电压技术,2011,37(1): 203–207.
- [4] 龚涛,唐飞,王晓浩. 一种“多针一网”结构的离子风特性研究[J]. 高压电器,2012,48(5): 33–36.
- [5] CHEN I Y, GUO Mei zuo, YANG Kai shing, et al. Enhanced cooling for LED lighting using ionic wind [J]. International journal of heat and mass transfer, 2013(57): 285–291.
- [6] MOLKI M, BHAMIDIPATI K L. Enhancement of convective heat transfer in the developing region of circular tubes using corona wind [J]. International journal of heat and mass transfer, 2004,47: 4301–4314.
- [7] SHEU W J, HSIAO J J, WANG Chi chuan. Effect of oscillatory EHD on the heat transfer performance of a flat plate [J]. International journal of heat and mass transfer, 2013,61: 419–424.
- [8] 陈志静. 电场强化气体对流传热研究进展与场协同原理[J]. 石油化工设备,2010,39(5): 48–52.
- [9] 李庆,李海凤,孙晓荣,等. 电晕放电电流体状态实验研究与数值模拟[J]. 高电压技术,2010,36(11): 2739–2744.
- [10] HUANG R T, SHEU W J, WANG Chi chuan. Heat transfer enhancement by needle-arrayed electrodes—An EHD integrated cooling system [J]. Energy conversion and management, 2009(50): 1789–1796.
- [11] 赵鑫,张剑飞,何雅玲,等. 离子风强化平板对流传热的数值模拟[J]. 工程热物理论,2014,35(3): 571–575.
- [12] 钟艳,罗小平. 微细通道 EHD 两相流传热研究[J]. 石油机械,2011,39(2): 7–11.
- [13] 杨侠,刘丰良,熊卉,等. EHD/脉动流混合强化传热换热器的传热与阻力特性实验研究[J]. 热能动力工程,2014,29(3): 256–261.
- [14] 李小华,包伟伟,王静,等. 基于电晕放电的大功率 LED 散热研究[J]. 发光学报,2015,36(10): 1195–1200.

(下转第 96 页)

折叠变形磁刺激圆形线圈空间磁场分析

张春兰¹, 逯 迈², 陈小强¹, 魏孔炳³

(1. 兰州交通大学 自动化与电气工程学院, 甘肃 兰州 730070; 2. 兰州交通大学 光电技术与智能控制教育部重点实验室, 甘肃 兰州 730070; 3. 甘肃省电力设计院, 甘肃 兰州 730050)

摘 要: 为了进一步提高圆形线圈的刺激聚焦度, 设计了沿不同位置折叠变形的圆形线圈. 通过数值模拟分析了变形折叠位置与折叠角度的圆形线圈空间磁场的分布. 与传统圆形线圈相比, 单侧离圆心0.5、1、1.5 cm处折叠的变形圆形线圈磁场聚焦度明显提高, 最佳折叠角分别是 $60^\circ \sim 90^\circ$ 、 $60^\circ \sim 105^\circ$ 和 $75^\circ \sim 105^\circ$. 而单侧离圆心2 cm处折叠变形圆形线圈、双侧离圆心2 cm处折叠变形圆形线圈, 空间磁场聚焦未能提高.

关键词: 经颅磁刺激; 变形圆形线圈; 磁场分布; 数值模拟

中图分类号: R318.6 **文献标志码:** A **doi:** 10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.021

0 引言

经颅磁刺激首先由 Baker 等^[1]于1985年提出, 为了改善圆形线圈的聚焦度, Ueno^[2]于1988年提出了著名的八字线圈. 经过近三十年的发展, 已被用于神经与精神疾病如抑郁、帕金森等的治疗, 且取得了很好的疗效, 同时也是脑功能研究中的重要工具^[3-4].

磁刺激的关键技术是感应电磁场分布及其聚焦性, 经颅磁刺激时, 需要对靶位置刺激, 避免非靶位置的刺激, 因而聚焦性的提高最为重要^[5-8], 研究磁刺激聚焦度的重要方法是数值模拟研究^[9-11].

笔者为了降低磁刺激过程中对非靶位置的刺激, 分别设计了离圆心0.5、1、1.5、2 cm处单侧和双侧变形折叠圆形线圈, 并对这几种类型的线圈进行空间磁场分布计算. 结果表明: 离圆心0.5、1.0、1.5 cm处的单侧折叠聚焦度有明显的提高, 且最佳折叠角分别为 $60^\circ \sim 90^\circ$ 、 $60^\circ \sim 105^\circ$ 和 $75^\circ \sim 105^\circ$. 而单侧离圆心2 cm处折叠变形圆形线圈、双侧离圆心2 cm处折叠变形圆形线圈, 空间磁场聚焦未能提高.

1 理论推导

将传统线圈沿平行于 x 轴的直线折起任意角

度 β , 如图1所示.

对于 P 点的计算需要对折起部分和未折起部分积分, 其中未折起部分, 直接将 P 点积分即可, 得到 B_{x1} 、 B_{y1} 、 B_{z1} ; 折起部分, 需对 P 点空间坐标转换, 转换公式^[12]如式(1)所示, 再转换成新的球坐标, 对折起部分进行积分.

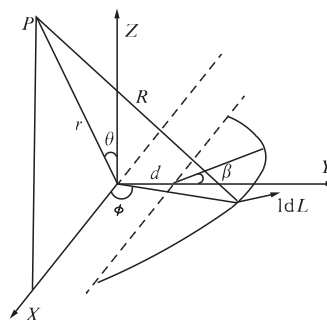


图1 单侧折叠线圈球坐标系

Fig.1 Spherical coordinates for circular coil with unilateral bending

折起部分积分以后得到 B'_{x2} 、 B'_{y2} 、 B'_{z2} , 然后还原为未折叠平面下的 B_{x2} 、 B_{y2} 、 B_{z2} ,

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \beta & \sin \beta \\ 0 & -\sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}. \quad (1)$$

变换公式如公式(2)^[12]所示, 由此可得到沿三个坐标轴的分量, 将未折叠和已折叠的空间磁

收稿日期: 2015-10-12; 修订日期: 2015-12-19

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51267010); 甘肃省杰出青年基金资助项目(1308RJDA013)

通信作者: 逯迈(1968—), 男, 甘肃天水人, 兰州交通大学教授, 博士, 主要从事生物医学电磁学、电磁暴露安全评估研究, E-mail: mai.lu@hotmail.com.

场分量相叠加,最终求得矢量和磁场强度 B .

$$\begin{bmatrix} B_{x2} \\ B_{y2} \\ B_{z2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \beta & -\sin \beta \\ 0 & \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B'_{x2} \\ B'_{y2} \\ B'_{z2} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

图2所示为双侧对称折叠. 此处分为3部分: 未折起部分、左侧折起部分和右侧折起部分. 折起部分的坐标转换可参照单侧折叠的转换公式,将求得的3部分磁场分量相叠加,最终求得矢量和磁场强度 B .

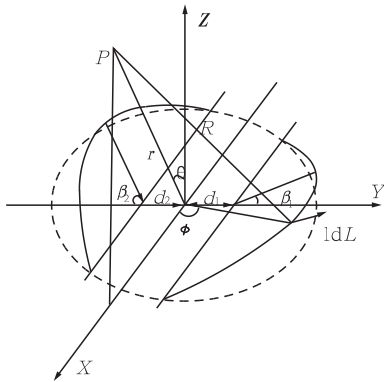


图2 双侧折叠线圈球坐标系

Fig. 2 Spherical coordinates for circular coil with bilaterally bending

2 单侧折叠变形圆形线圈对空间磁场分布影响

采用数值积分法,对单侧折叠线圈进行空间磁场计算仿真,分别为离圆心 0.5、1、1.5、2 cm 处折叠的变形圆形线圈. 这里重点介绍沿平行与直径且离圆心 1.0 cm 的直线沿任意角度折叠. 基本参数设置为半径 $a = 2.5$ cm, 脉冲电流峰值为 10 000 A, 共 10 匝.

图3是单侧折叠线圈在折叠角度是 30° 、高度为 -8 mm 的平面磁场的三维模拟图. 图4单侧折叠的变形圆形线圈(折起 30°) Z 平面不同高度的磁感应强度. 图5是离圆心 1.0 cm 单侧折叠的变形圆形线圈折起不同角度在 $z = -3$ mm 时的磁感应强度.

由图4可知,离线圈的距离越大,最高点的衰减越明显,即离线圈的距离不能太远,否则聚焦度反而下降.

由图5可以看出,在离圆心 1 cm 处折叠的变形圆形线圈,在高度一定且角度不同时,双峰变为单峰,且最高数值减少不明显,即折叠后的线圈比传统圆形线圈聚焦度有很大的提高.

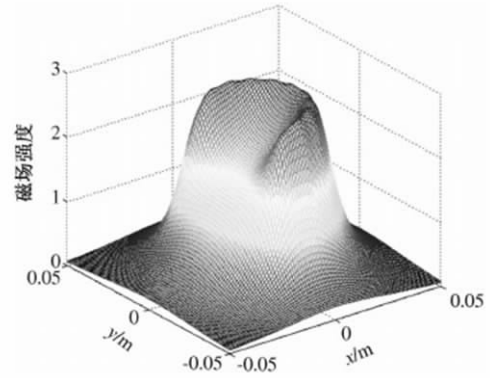


图3 单侧折叠的变形圆形线圈折起

30° 时高度 $z = -8$ mm 平面的磁感应强度

Fig. 3 The magnetic induction density at the position of $z = -8$ mm plane for circular coil unilaterally bended with an angle of 30°

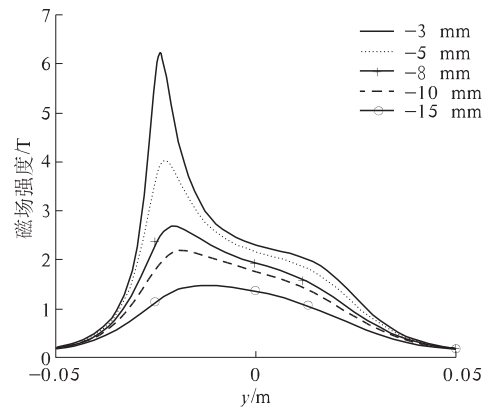


图4 单侧折叠的变形圆形线圈(折起 30°) z 平面不同高度的磁感应强度

Fig. 4 The magnetic induction density at the different position on z plane for circular coil unilaterally bended with an angle of 30°

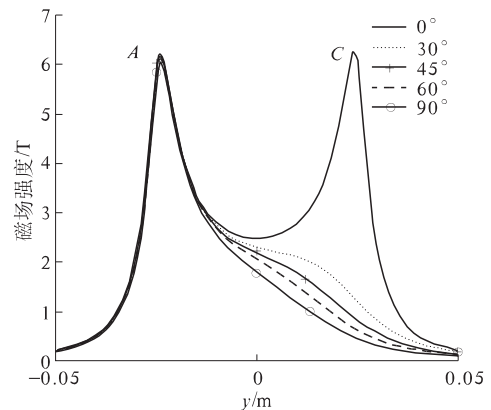


图5 单侧折叠的变形圆形线圈折起不同角度在 $z = -3$ mm 时的磁感应强度

Fig. 5 The magnetic induction density for different bending angles at the height of $z = -3$ mm

图6是不同位置的单侧折叠变形圆形线圈在

不同折叠角度且 $Z = -8\text{ mm}$ 时的空间磁场分布图. 从图 6 可以看出, 离圆心相同距离时, 随着角度的增大, 最高点和传统圆形线圈相比没有明显的下降, 但是右半部分的衰减很明显, 以很快的速度下降, 聚焦度得到提高. 然而对比离圆心 1 cm 和 2 cm 单侧折叠, 在相同角度时, 发现离圆心 2 cm 的单侧折叠衰减相对缓慢.

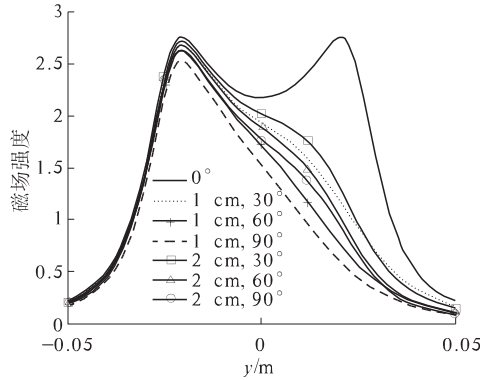


图 6 单侧不同位置折叠的变形圆形线圈折起不同角度在 $z = -8\text{ mm}$ 时的磁感应强度
Fig. 6 The magnetic induction density for different bending angles at the height of $z = -8\text{ mm}$

表 1~4 为不同位置的单侧折叠圆形线圈折起不同角度时在 $z = -3\text{ mm}$ 时对比传统圆形线圈的两磁场峰值 A 点和 C 点的百分比.

表 1 离圆心 0.5 cm 处单侧折叠变形圆形线圈感应强度值随折起角度的变化规律
Tab. 1 Dependence of magnetic induction density on bending angles for circular coil unilaterally bended along a line 0.5 cm away from the coil center

折起角度 / (°)	A 点磁场强度 / T	占传统线圈 A 点百分比 / %	C 点磁场强度 / T	占传统线圈 C 点百分比 / %
0	6.291 6	100.0	6.291 6	100.0
15	6.255 4	99.4	2.236 6	36.0
30	6.218 4	98.8	1.286 7	21.1
45	6.178 2	98.2	0.876 2	14.4
60	6.131 7	97.5	0.661 0	10.6
75	6.074 7	96.6	0.540 3	8.2
90	6.000 5	95.4	0.471 2	6.7
105	5.898 7	93.8	0.431 4	5.6

注: A、C 点见图 5.

表 1~4 分别为离圆心 0.5、1、1.5、2 cm 的单侧折叠变形圆形线圈的变化规律. 为了保证未折起侧(A 点)有足够的磁场峰值以及折起侧(C 点)有较大的磁场衰减, 定义未折起侧磁场峰值占传统圆形线圈峰值的 95% 以上, 折起侧占传统

圆形线圈磁场峰值的 10% 以下的变形圆形线圈为最佳变形线圈, 其折起角度为最佳折起角^[13].

表 2 离圆心 1 cm 处单侧折叠变形圆形线圈感应强度值随折起角度的变化规律
Tab. 2 Dependence of magnetic induction density on bending angles for circular coil unilaterally bended along a line 1 cm away from the coil center

折起角度 / (°)	A 点磁场强度 / T	占传统线圈 A 点百分比 / %	C 点磁场强度 / T	占传统线圈 C 点百分比 / %
0	6.291 6	100.0	6.291 6	100.0
15	6.263 1	99.6	2.236 6	35.5
30	6.234 2	99.1	1.286 7	24.5
45	6.202 8	98.6	0.876 2	13.9
60	6.166 0	98.0	0.661 0	10.5
75	6.120 0	97.3	0.540 3	8.6
90	6.058 5	96.3	0.471 2	7.5
105	5.971 1	94.9	0.431 4	6.9

注: A、C 点见图 5.

表 3 离圆心 1.5 cm 处单侧折叠变形圆形线圈感应强度值随折起角度的变化规律
Tab. 3 Dependence of magnetic induction density on bending angles for circular coil unilaterally bended along a line 1.5 cm away from the coil center

折起角度 / (°)	A 点磁场强度 / T	占传统线圈 A 点百分比 / %	C 点磁场强度 / T	占传统线圈 C 点百分比 / %
0	6.291 6	100.0	6.291 6	100.0
15	6.270 0	99.7	2.199 0	35.0
30	6.248 3	99.3	1.248 4	19.8
45	6.224 7	98.9	0.864 7	13.7
60	6.196 9	98.5	0.687 7	10.9
75	6.161 3	97.9	0.603 7	9.6
90	6.112 5	97.2	0.563 5	9.0
105	6.040 6	96.0	0.544 1	8.6
120	5.926 1	94.2	0.534 3	8.5

注: A、C 点见图 5.

从表 1 可以看出, $60^\circ \sim 90^\circ$ 的 A 点磁场值所占比列分别为 97.5% ~ 95.4%, C 点磁场值所占比列分别为 10.6% ~ 6.7%, 基本符合最佳折起角条件. 从表 2 可以看出, $60^\circ \sim 105^\circ$ 的 A 点磁场值所占比列分别为 98% ~ 94.9%, C 点磁场值所占比列分别为 10.5% ~ 6.9%, 基本符合最佳折起角条件. 从表 3 可以看出, $75^\circ \sim 105^\circ$ 的 A 点磁场值所占比列分别为 97.9% ~ 96%, C 点磁场值所占比列分别为 9.6% ~ 8.6%, 基本符合最佳折起角条件. 从表 4 可以看出, 虽然 A 点磁场所占比

例很高,但是 C 点磁场值衰减也相当缓慢,不符合最佳折起角的条件。

表4 离圆心 2 cm 处单侧折叠变形圆形线圈感应强度值随折起角度的变化规律

Tab.4 Dependence of magnetic induction density on bending angles for circular coil unilaterally bended along a line 2 cm away from the coil center

折起角度 $\theta/(\circ)$	A 点磁场值 B/T	占传统线圈 A 点百分比/%	C 点磁场值 B/T	占传统线圈 C 点百分比/%
0	6.291 6	100.0	6.291 6	100.0
15	6.275 9	99.8	2.140 2	34.0
30	6.260 2	99.5	1.236 7	19.7
45	6.243 1	99.2	0.925 7	14.7
60	6.222 9	98.9	0.805 8	12.8
75	6.196 8	98.5	0.757 1	12.0
90	6.160 5	97.9	0.736 5	11.7
105	6.105 7	97.0	0.727 3	11.6
120	6.015 6	95.6	0.722 8	11.5
135	5.851 7	93.0	0.719 9	11.4

注: A、C 点见图 5。

3 双侧折叠变形圆形线圈对空间磁场分布影响

图 7 是双侧对称折叠线圈在折叠角度是 30° , 高度为 -8 mm 的平面磁场的三维模拟图。由图 7 可知, 双侧折叠后出现双峰, 聚焦度明显不如单侧折叠的效果好。由于双侧折叠聚焦度反而变差, 故不宜采用该方法。

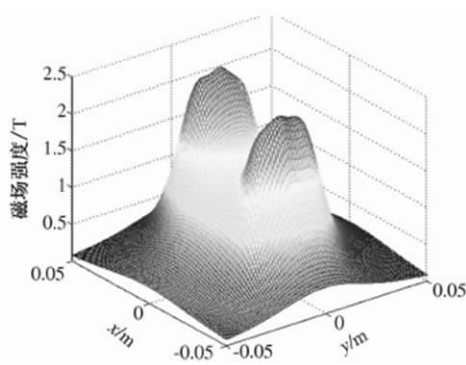


图7 双侧对称折叠的变形圆形线圈折起 30°

时高度 $z = -8$ mm 平面的磁感应强度

Fig.7 The magnetic induction density at the position of $z = -8$ mm plane for circular coil bilaterally bended with an angle of 30° degree

4 结论

(1) 随高度沿 z 轴负方向增加, 单侧折叠和双侧折叠线圈的空间磁场与传统圆形线圈相似, 峰

值逐层衰减, 但是衰减速度不同。

(2) 离圆心 0.5 cm 处的单侧折叠变形圆形线圈的最佳折叠角是 $60^\circ \sim 90^\circ$, 离圆心 1 cm 处的单侧折叠变形圆形线圈的最佳折叠角是 $60^\circ \sim 105^\circ$, 离圆心 1.5 cm 处的单侧折叠变形圆形线圈的最佳折叠角是 $75^\circ \sim 105^\circ$, 对靶位置的刺激强度基本不变的情况下, 减少了对非靶位置的刺激。

(3) 离圆心 2 cm 处的单侧折叠变形圆形线圈没有最佳折叠角, 虽然未折叠部分衰减很小, 但是折叠部分的衰减过于缓慢, 因此效果不是很理想。

(4) 双侧折叠聚焦效果没有单侧折叠效果好, 双侧折叠以后出现两个峰值, 聚焦度反而下降。

参考文献:

- [1] BARKER A T, JALINOUS R, FREESTON I L. Non-invasive simulation of the human motor cortex [J]. Lancet, 1985, 325: 1106 - 1107.
- [2] SHOOGO U, TASHIRO T, HARADA K. Localized stimulation of neural tissues in the brain by means of a paired configuration of time-varying magnetic fields [J]. Appl Phys, 1988, 64(10): 5862 - 5864.
- [3] BERARDELLI A, SUPPA A. Recent advances in the pathophysiology of parkinson's disease: evidence from fMR and TMS studies [J]. Experimental neurology, 2011, 227(1): 10 - 12.
- [4] LEVKOVITZ Y, SHEER A, HAREL E V, et al. Differential effects of deep TMS of the prefrontal cortex on apathy and depression [J]. Brain stimulation, 2011, 23(6): 529 - 536.
- [5] LU M, SHOOGO U, THORLIN N T, et al. Calculating the current density and electric field in human head by multichannel transcranial magnetic stimulation [J]. IEEE Transactions on magnetics, 2009, 45(3): 1662 - 1665.
- [6] 蒲丽娜, 殷涛, 安好, 等. 提高脑神经磁刺激感应电场聚焦性能的线圈参数优化方法的研究 [J]. 生物医学工程研究, 2008, 27(2): 74 - 78.
- [7] 于阳, 李玥, 张广浩, 等. 适用于临床及动物试验的高频重复经颅磁刺激系统设计及应用 [J]. 高压电技术, 2013, 39(1): 181 - 187.
- [8] 尹宁, 徐桂芝, 于洪丽, 等. 磁刺激穴位对大脑功能网络的影响 [J]. 生物医学工程学报, 2013, 32(2): 184 - 190.
- [9] LAAKOS I, HIRATA A. Effects of coil orientation on the electric field induced by TMS over the hand motor area [J]. Phys Med Biol, 2014, 59(1): 203 - 218.

- [10] 范春珍,王俊俏,程永光,等. 铁磁壳层纳米颗粒周围局域电场的研究[J]. 郑州大学学报(工学版), 2013,34(3):26-19.
- [11] LU M,SHOOGO U,THORLIN T,et al. Calculating the activating function in the human brain by transcranial magnetic stimulation [J]. IEEE Transactions on magnetics,2008,44(6):1438-1441.
- [12] 魏孔炳,董绪伟,逯迈,等. 经颅磁刺激圆形线圈变形对空间磁场分布的影响[J]. 科学技术与工程, 2014,14(3):13-17.
- [13] 魏孔炳,逯迈,董绪伟,等. 磁刺激八字线圈变形对空间磁场与感应电场分布的影响[J]. 中国生物医学工程学报,2014,33(4):425-430.

Analysis of the Magnetic Induction Field Distribution for Deformed Round Coil with Bending Angle in Magnetic Stimulation

ZHANG Chunlan¹, LU Mai, CHEN Xiaoqiang¹, WEI Kongbing³

(1. School of Automation and Electrical Engineering, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China; 2. Key Lab of Opto-Technology and Intelligent Control of Ministry of Education, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China; 3. Gansu Electric Power Design Institute, Lanzhou 730050, China)

Abstract: In order to improve the stimulation focality, the deformed round coils with different bending angles at different positions have been designed. 3D distributions of the magnetic induction fields have been obtained through numerical simulations, and the results were compared with that of conventional round coil. Results show that stimulation focality can be well improved when the coil was unilaterally bended along a line 0.5 cm and 1 cm and 1.5 cm away from the coil center, and the best bending angle was $60^\circ \sim 90^\circ$, $60^\circ \sim 105^\circ$ and $70^\circ \sim 105^\circ$ respectively. While for other cases i. e. unilaterally bending 2 cm away from the coil center, bilaterally bending etc., the focality become worse.

Key words: transcranial magnetic stimulation; deformed round coil; magnetic field distribution numerical simulation

(上接第 91 页)

Cooling Performance Study of Ionic Wind Excited by Needles – Net Structure

WANG Jing, CAI Yixi, BAO Weiwei, LI Huixia

(School of Automotive and Traffic Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

Abstract: Based on the principle of corona discharge, a needles-net structure generator was designed. The ionic wind excitation was implemented, and it was used for high power LED chip heat dissipation. The experimental study of generator's electrical properties change and its effect on the properties of high power LED heat dissipation under different discharge gap, voltage polarity and electrode arrangement were carried out. The cooling performances of the ionic wind generator and the cooling fan were compared. The results show that, the heat dissipation performance of negative corona discharge is superior to the positive corona discharge under the same conditions, and the discharge spacing is smaller, the lower LED pin temperature it is. The best cooling performance will be reached at 1×11 needles array form, and the lowest LED pin temperature is 52.3°C when the discharge power is more than 10 W. The device can realize the heat dissipation effect more close to a cooling fan, and it is suitable for high power LED chip heat dissipation.

Key words: corona discharge; ionic wind; high power LED; enhancement of heat transfer; junction temperature