

ISSN 1000-5013 CN 35-1079/N CODEN HDZIEF

華僑大学学报

(自然科学版) JOURNAL OF HUAQIAO UNIVERSITY (NATURAL SCIENCE)

> 第 45 卷 第 4 期 Vol. 45 No. 4

2024

中国 • 泉州 / 厦门 CHINA • QUANZHOU / XIAMEN



《华侨大学学报(自然科学版)》 第七届编辑委员会 The Seventh Editorial Committee of Journal of Huaqiao University (Natural Science)

- 主 任 (Director of Editorial Committee) 张云波 (ZHANG Yunbo)
- **副主任 (Vice Director of Editorial Committee)** 陈国华 (CHEN Guohua) 黄仲一 (HUANG Zhongyi)

编 委 (Members of Editorial Committee) (按姓氏笔画为序) 刁 勇 (DIAO Yong) 王士斌 (WANG Shibin) 刘 塨 (LIU Gong) 江开勇 (JIANG Kaiyong) 涛 (SUN Tao) 孙 肖美添 (XIAO Meitian) 吴季怀 (WU Jihuai) 宋秋玲 (SONG Qiuling) 张认成(ZHANG Rencheng) 张云波 (ZHANG Yunbo) 陈国华 (CHEN Guohua) 苑宝玲 (YUAN Baoling) 周树峰 (ZHOU Shufeng) 郑力新 (ZHENG Lixin) 徐西鹏 (XU Xipeng) 郭子雄 (GUO Zixiong) 黄仲一 (HUANG Zhongyi) 黄华林 (HUANG Hualin) 葛悦禾 (GE Yuehe) 蒲继雄 (PU Jixiong) 蔡绍滨 (CAI Shaobin)

主 编 (Editor in Chief)

黄仲一 (HUANG Zhongyi)

华侨大学学报

(自然科学版)

2024 年 7 月

总第 198 期

第45卷 第4期



综合述评

废水中离子液体高级氧化降解研究进展

采用 Cell-SELEX 技术的核酸适配体在肿瘤靶向治疗的研究进展

多维感知视角下的多元景观研究进展

学术论文

大客车尾翼的数值模拟与风洞试验

概率预测强化学习下非结构环境机械臂变阻抗力跟踪控制

.....董梓呈,胡伟石,邵辉,郭霖(461)

机器人石材雕刻粗加工能耗建模与优化分析

温湿耦合循环对 SBS 改性沥青胶浆的性能影响 采用层次分析法的香港地区历史建筑遗产保护价值评价 ······ 李子莹,杨晓翔 (487) 粤港澳大湾区大气碳污协同减排水平评估 艾比湖流域 LUCC 驱动的碳储量时空动态特征与多情景预测 ······布威阿依谢姆·吐合提,阿布都热合曼·哈力克,姚凯旋, 魏倩倩,姚磊,唐华,罗健梅,段越帆(501) 多特征融合的焊缝图像多标签分类算法 非局部 Gray-Scott 模型的二阶线性化差分格式 非线性 Schrödinger 方程的龙格库塔配点格式

期刊基本参数: CN 35-1079/N * 1980 * b * A4 * 120 * zh * P * ¥10.00 * 1 000 * 13 * 2024-07 * n

JOURNAL OF HUAQIAO UNIVERSITY

(NATURAL SCIENCE)

Vol. 45 No. 4

Sum 198

Jul. 2024

CONTENTS

COMPREHENSIVE REVIEW

ResearchProgress on Degradation of Ionic Liquids in Wastewater Through Advanced

Oxidative Processes

······ CHEN Xiaoyuan, JIN Chunying, LIN Jinqing (423)

Research Progress of Aptamers Using Cell-SELEX Technology in Cancer Targeted

Treatment

..... CHENG Zhiyun, CHEN Jiayi, BAI Ruyu,

YANG Huiyong, MOHSAN Ullah, DIAO Yong (439)

Research Progress on Multi-Landscapes From Multi-Dimensional Perception Perspective

ACADEMIC PAPERS

Numerical Simulation and Wind Tunnel Testing of Coach Rear Spoiler

...... YANG Yongbai, WANG Jingyu, ZHUANG Guohua (454)

Probability Prediction Reinforcement Learning for Variable Impedance Force Tracking

Control of Robotic Arms in Unstructured Environments

..... DONG Zicheng, HU Weishi, SHAO Hui, GUO Lin (461)

Modeling and Optimization Analysis of Energy Consumption in Rough Machining of

Robotic Stone Carving

··· HUANG Jixiang, YIN Fangchen, HUANG Shengui, ZHANG Shunde, GU Lizhi (471)

Effect of Temperature and Humidity Coupling Cycles on Performance of SBS Modified

Asphalt Mastic

..... TAN Bo, FAN Yuzhu, LI Qing, XIE Enlian, LIU Jingshuang (478)

Evaluation of Conservation Value of Historical Building Heritage in Hong Kong Region

Using Analytic Hierarchy Process

..... LI Ziying, YANG Xiaoxiang (487)

Evaluation of Carbon and Pollution Synergy Reduction Levels in Atmosphere in

Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area

..... HE Sinan, SHI Longyu (494)

Spatio-Temporal Dynamics Characteristic and Multi-Scenario Prediction of Carbon

Storage Driven by LUCC in Ebinur Lake Basin

..... BUWEIAYXIEMU • Tuheti, ABUDUREHEMAN • Halike, YAO Kaixuan,

WEI Qianqian, YAO Lei, TANG Hua, LUO Jianmei, DUAN Yuefan (501)

Weld Image Multi-Label Classification Algorithm Based on Multi-Feature Fusion

..... NIU Dun, LIN Ning, LIN Zhenchao,

HUANG Kai, WANG Hejia, ZHENG Lixin (514)

Second-Order Linearized Difference Scheme for Nonlocal Gray-Scott Model

..... CHEN Xinyan, ZHANG Xinxin, CAI Yaoxiong (524)

Runge-Kutta Collocation Scheme for Nonlinear Schrödinger Equation

...... YAO Mengli, TENG Yuhang, LAI Yiying, WENG Zhifeng (534)

Serial Parameters: CN 35-1079/N * 1980 * b * A4 * 120 * zh * P * ¥10.00 * 1 000 * 13 * 2024-07 * n

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202407036



废水中离子液体高级氧化降解研究进展

陈晓缘1,金春英2,林金清1

(1. 华侨大学 材料科学与工程学院,福建 厦门 361021;
 2. 华侨大学 化工学院,福建 厦门 361021)

摘要: 离子液体(ionic liquids, ILs)是一类具有特殊性质的新兴材料,但其在水中的溶解度相对较高,容易 通过废水排放进入水生系统并在环境中积累,且其结构非常稳定,难以被生物降解,具有潜在的生物毒性,因 此被认为是一类持久污染物。高级氧化技术(advanced oxidation processes, AOPs)是一种高效降解难降解有 机污染物的新技术,已被用于降解废水中的离子液体。文中综述芬顿和类芬顿氧化、阳极氧化、电芬顿氧化、 光氧化、光催化氧化、光芬顿氧化及电光芬顿氧化等高级氧化技术降解处理废水中离子液体的研究进展;着重 讨论各种氧化技术的降解动力学、降解机理、降解途径和优缺点,以及操作条件、离子液体的阴阳离子、侧链长 度等因素对降解反应的影响规律,总结目前存在的问题,并对高级氧化技术降解处理离子液体的未来的研究 方向及其前景进行了展望。

关键词: 离子液体;高级氧化技术;废水处理;氧化降解 中图分类号: X 703.1;O 645.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2024)04-0423-16

ResearchProgress on Degradation of Ionic Liquids in Wastewater Through Advanced Oxidative Processes

CHEN Xiaoyuan¹, JIN Chunying², LIN Jinqing¹

College of Materials Science and Engineering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China;
 College of Chemical Engineering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China)

Abstract: Ionic liquids (ILs) are a class of emerging materials with special properties, but their solubility in water is relatively high, making them easy to enter aquatic systems through wastewater discharge and accumulate in the environment. Their structure is very stable and difficult to biodegrade, making them a persistent pollutant with potential biological toxicity. Advanced oxidation processes (AOPs) is a new technology which can degrade recalcitrant organic pollutants efficiently and has been used to degrade ionic liquids in wastewater. This article reviews the research progress on the degradation and treatment of ILs in wastewater using various AOPs including Fenton and Fenton-like oxidation, anodic oxidation, electro-Fenton oxidation, photo-oxidation, photocatalytic oxidation, photo-Fenton oxidation, and photoelectro-Fenton oxidation. The review mainly focuses on discussing the degradation kinetics, mechanisms, pathways, advantages and disadvantages of these oxidation technologies. Additionally, the impact of operating conditions, anions and cations of ILs, and side chain length on degradation reactions are examined. The current challenges are summarized, and future research directions and prospects for AOPs in the degradation and treatment of ILs are proposed.

收稿日期: 2024-07-10

通信作者: 林金清(1963-),男,教授,博士,博士生导师,主要从事离子液体的设计合成及其绿色催化、高级氧化技术 处理新污染物的研究。E-mail:linlab@hqu.edu.cn。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(22278165, 21803021, 21246008); 福建省自然科学基金资助项目 (2020J01065)

Keywords: ionic liquids (ILs); advanced oxidation process (AOPs); wastewater treatment; oxidative degradation

离子液体(ionic liquis, ILs)是指常温或近常温(一般指 100 ℃)下以阴阳离子为主体的熔融盐,它 一般由体积相对较大的结构不对称的有机阳离子与体积较小的无机或有机阴离子组成。离子液体由于 其结构特点,具有蒸汽压低、液态范围和电化学窗口宽、稳定性高、电化学性能好、溶解性优异、结构和性 质可调、种类众多、可循环使用等特性,被认为是一类新型的绿色溶剂和软物质材料,已引起了广泛的研 究和应用,是当代绿色化学的研究前沿^[1]。然而由于大多数离子液体在水中的溶解度都较大,因此在其 合成、纯化、使用及回收再生等过程中极易通过工业废水进入到环境中。

随着研究不断深入,人们发现离子液体并非完全真正"绿色",对生态环境和人类具有潜在的毒性^[2]。由于离子液体结构的稳定性,大多数离子液体难以被生物降解,而高级氧化技术(advanced oxidation process, AOPs)被认为是一种高效降解难降解有机污染物的新技术,因此广泛应用于降解废水 中的离子液体^[3]。本文将重点综述废水中离子液体的高级氧化降解研究进展。

1 离子液体的特性及其应用

离子液体按照其阳离子可以分为吡啶类、咪唑类、季鏻类和季铵类等,而其阴离子主要有 Cl⁻, [BF₄]⁻,[PF₆]⁻,[N(CN)₂]⁻等。常见的离子液体的阳、阴离子结构和名称,分别如图 1,2 所示。



图 2 离子液体的常用阴离子

Fig. 2 Most commonly used anions in ionic liquids

因为阴、阳离子体积差异大,离子液体的结构不对称,离子间的静电引力较弱,因而具有较小的晶格

能,在常温或近常温下呈液态。离子液体具有以下7个独特的性质[4-5]。

1) 几乎不挥发或蒸汽压很小。可用于真空反应,易于回收循环利用,不易对大气造成污染,是传统 溶剂的优良替代品,因此被称为绿色溶剂。

2)液态范围非常宽。下限低于室温,甚至可低至一100℃,因其不会气化,故其液态上限就是其热分解温度,可达到300℃以上。常用的溶剂中水的液态范围只有0~100℃,而大多数有机溶剂的液态范围更窄。因此可为很多过程提供了更大的温度操作范围,极大地拓宽了其应用空间。

3) 良好的电化学性能。离子液体的电化学宽口可达4V以上,电导率较高,电化学性质稳定。

4)高热稳定性。离子液体有着良好的热稳定性和化学稳定性,因此离子液体常常被用作高温反应 中的反应介质。

5) 优异的溶解性。可溶解大多数有机物,甚至可以溶解无机物、有机金属和高分子材料。

6)结构和性质可调,种类众多,合成简单。改变阴阳离子的结构,可设计合成10¹⁸种以上不同的离子液体,并可调节改变包括酸碱性、亲疏水性等各种物理化学性质,且还易于功能化,而其合成方法非常简单,一般只要通过一步反应就可直接合成得到。

7)离子液体的热容大,还具有有机溶剂不具备的不可燃性,因此具有很高的工业应用安全性。

由于离子液体具有独特的性质,因此已在众多领域得到非常广泛的应用[6]。

1) 在有机合成反应中的应用。离子液体不仅可以作为有机合成反应的溶剂,还同时可以作为其反应的催化剂,因此在加成反应、缩合反应、偶合反应、酯化反应、酰基化反应、硝化反应、异构化反应、酯交换反应、重排反应、D-A反应,Heck反应、烯烃环氧化反应、酶催化反应等许多反应中得到广泛应用。

2)在分离过程中的应用。离子液体可代替传统的有机溶剂,已在液液萃取、气体吸收、萃取精馏以 及膜分离等方面得到了广泛的应用。

3) 在分析化学中的应用。离子液体已被用作气相和液相色谱的固定相。

4)在电化学中的应用。离子液体可被用作锂离子电池的电解液,在电沉积、电容器、燃料电池、太阳能电池、修饰电极和传感器等方面的应用也取得很大的进展。

5) 在聚合反应中的应用。离子液体与过渡金属具有弱配位作用,被用作烯烃低聚反应的介质,可 克服过渡金属在有机溶剂中溶解度低的问题,还被用于二烯烃的选择性聚合,选择性可达到 100%。

6)在功能材料中的应用。离子液体可以代替水和有机溶剂制备功能材料,在纳米材料、液晶、人工 肌肉、润滑、增塑剂、抗静电等方面的应用已得到广泛的关注和研究。

7)在生命科学药物中的应用。离子液体已被应用于生命科学和药物,这是近年来的一个新趋势, 也是离子液体未来发展中的一个最有前景的应用领域。

2 离子液体的毒性

近年来,关于离子液体毒性的研究报道屡见不鲜,并且已经得到了部分离子液体毒性的数据和影响 离子液体毒性的规律,主要体现以下5个主要方面。

1) 离子液体对酶具有抑制作用。Ranket 等^[7]综合报道了 292 种离子液体对乙酞胆碱酯酶的抑制 值,结果表明,几乎所有的抑制作用都与离子液体阳离子结构有关,且烷基季磷类>吡啶类>咪唑类,除 $[SbF_6]^- n[PF_6]^- 外所有的阴离子对酶的活性都没有抑制作用。此外,当离子液体的烷基碳链长度增$ 加时,由于亲脂性增强,其对酶的抑制作用也会相应增强。Skladanowski 等^[8]研究了咪唑类离子液体 $对脱氨基酶的抑制作用,结果表明<math>[PF_6]^- n[BF_4]^- n Cl^- n p-TS^- 会抑制脱氨基酶的活性,且前两种$ 阴离子的抑制作用大于后两种阴离子。

2)离子液体对细菌和真菌具有急性抑制作用,这种作用表现为抑制微生物的生长速度和繁殖。 Pernak等^[9]研究了一系列咪唑类、吡啶类和季铵盐类离子液体对球菌、杆菌和真菌的毒性,结果表明, 离子液体对微生物的抑制作用主要取决于阳离子的结构,阴离子对其抑制作用的影响不明显。 Docherty等^[10]考察了带有不同烷基侧链的咪唑和吡啶类离子液体对微生物生理和呼吸功能的影响,结 果表明,溴化丁基或辛基的离子液体对埃希氏大肠杆菌、金黄色葡萄球菌、枯草芽抱杆菌、荧光假单胞菌 和酿酒酵母菌等都表现出较强的抑制抗菌作用。

3) 离子液体的细胞毒性。Stepnowski 等^[11]研究了[BMIM]Cl,[BMIM]BF₄和[BMIM]PF₆三种 常见离子液体的细胞毒性。结果表明,阴离子的结构起决定性作用,其中,[BF₄]⁻对 Hela 细胞生长的 最低影响浓度为 0.63 mmol·L⁻¹,而[PF₆]⁻和 Cl⁻的最低浓度均大于 10 mmol·L⁻¹。但由于氟化物 会水解生成一系列的有毒的降解产物,导致了[PF₆]⁻对细胞生长也产生了抑制作用。

4)离子液体的植物毒性。藻类是水生植物毒性评价中最具代表性的生物,在被测试的离子液体中,咪唑阳离子与长烷基链阴离子结合的毒性最强^[12]。有研究发现离子液体对淡水月牙藻的生长有很大的抑制作用,对绿色微细胞海藻的生长影响的毒性是有机溶剂的 2~4 个数量级^[13]。

5)离子液体的动物毒性。目前,离子液体动物毒性的研究还十分有限。研究结果表明,1-丁基-3-甲基咪唑氯盐[C₄MIM]Cl造成50%大鼠死亡(LD₅₀)的剂量约为550 mg·kg⁻¹,而甲醇和二甲基亚砜 的LD₅₀值分别为5600和15000~30000 mg·kg⁻¹,相比而言,[C₄MIM]Cl是剧毒的^[14]。Li等^[15]研 究了1-辛基-3-甲基咪唑溴盐([C₈MIM]Br)对金鱼的急性毒性和表面损伤,通过扫描电镜和组织学观 察,发现金鱼的肠道、鳃、皮肤等都有损伤,结果表明[C₈MIM]Br 是一种对生物具有中等毒性的化学物 质。Pretti等^[16]通过研究1-辛基-3-甲基咪唑六氟磷酸盐([OMIM]PF₆)离子液体对DNA损伤、斑马鱼 的抗氧化酶活性等所产生的影响。结果发现,斑马鱼体内的活性氧基团尤其是两个关键的抗氧化 酶——氧化还原酶和超氧化物歧化酶的活性在高浓度离子液体中显著降低,具有较长取代侧链的两种 季铵盐类离子液体对鱼类具有很高的致命毒性。

尽管目前离子液体对 DNA 损伤、基因毒性、遗传毒性、致癌性和生物累积性等方面的数据还严重 匮乏,但离子液体的生物毒性和对生态系统的影响已引起普遍高度的重视和广泛的研究。

3 废水离子液体的高级氧化降解技术

离子液体的结构决定了它的性质比较稳定,不容易发生降解,属于持久性难降解有机污染物,很难 通过温和的生物作用来降解。虽然也有人尝试采用吸附、超滤、混凝和离子交换等物理或物理化学的方 法处理离子液体废水,但由于处理效果和成本的原因,这些方法并没有得到深入的研究。

高级氧化技术(AOPs)是一种通过强氧化剂(如羟基自由基等)来深度氧化降解水中的污染物,以 提高可生化性,使其转化为容易生物降解的小分子物质,甚至直接矿化为无害的二氧化碳和水等无机物 质的水处理新技术。因为它具有处理效果好、反应速度快、适用范围广等优点,因此在工业废水、市政污 水、饮用水等领域得到了广泛应用。近年来,高级氧化技术也被用于降解离子液体,已引起广泛的关注 和研究^[3-4]。

高级氧化技术按氧化反应是否在水相中进行分为均相氧化和非均相氧化。均相氧化包括臭氧氧化、超声氧化、电氧化、光氧化和传统芬顿氧化;非均相高级氧化包括类芬顿氧化、电助催化氧化(包括阳极氧化、电芬顿氧化和光电芬顿氧化)光助催化氧化(光氧化、光芬顿氧化,光催化氧化和光催化芬顿氧化)等。高级氧化技术按氧化活性物质产生方式的不同分为臭氧氧化、超声氧化、芬顿氧化、电助氧化、光助氧化等。由于臭氧氧化、超声氧化和光氧化单独处理的效果有限难于达到排放要求,而传统芬顿氧化存在 pH 值要求高(pH=2.7~3.5)且有大量的铁污泥产生等缺点,目前已较少研究。因此,文中着重对近年来发展较快的类芬顿氧化(包括催化湿式氧化)、电助芬顿氧化和光助催化氧化等高级氧化技术降解离子液体的研究进展进行综述和分析。为了便于比较和理解,在类芬顿氧化法中也同时简单综述一下传统芬顿氧化法。

3.1 芬顿和类芬顿氧化法

传统的均相芬顿氧化法是用二价铁盐(如 FeSO4)催化活化 H2O2 产生强氧化性的羟基自由基,以 氧化降解水中的污染物。以二价铁之外的催化剂活化氧化剂产生活性物种的原理与芬顿法类似,称为 类芬顿氧化法;而将催化剂负载或固定在某种载体上,就成了非均相芬顿类芬顿氧化法。芬顿和类芬顿 氧化机理如图 3 所示^[4]。

2008年,Siedlecka等^[17]首次采用类芬顿法降解废水中的1-丁基-3-甲基咪唑氯盐。在离子液体的



图 3 芬顿和类芬顿氧化降解离子液体机理示意图[4]

Fig. 3 Schematic diagram of Fenton and Fenton like oxidation degradation mechanism of ionic liquids^[4] 初始浓度为1 mmol・L⁻¹,25 ℃,以及在 pH=3.5,Fe³⁺和 H₂O₂ 的加入量分别为1 和 400 mmol・L⁻¹ 的最佳的操作条件下降解 150 min,离子液体的去除率(以阳离子的去除率计)超过 99%。Domínguez 等^[18]进一步研究了 1-丁基-3-甲基咪唑氯盐的降解动力学。结果表明,在 25 ℃,pH=3 和离子液体的 初始浓度为 100~2 000 mg・L⁻¹之间时,该降解反应符合一级动力学模型。

Munoz 等^[19]研究了 1-乙基-3-甲基咪唑氯盐、1-丁基-4-甲基吡啶氯盐、四丁基鏻氯盐和四丁基氯化 铵 4 种离子液体的阳离子结构对降解的影响。在相同的初始浓度(1 mmol・L⁻¹)、相同的 H₂O₂ 和 Fe³⁺用量以及相同的 pH 值(pH=3)、温度(70 ℃)下进行降解,结果表明芳香阳离子的总有机碳(TOC)去除率超过 60%,而脂肪族阳离子的总有机碳(TOC)去除率低于 40%。说明与脂族阳离子(鳞、铵)相比,由于离域双键的存在,芳香族阳离子(咪唑鎓、吡啶鎓)的降解发生得更快。

Gomez-Herrero 等^[20]研究了 1-丁基-4-甲基吡啶鎓氯盐和 1-己基-3-甲基咪唑鎓氯盐的降解。结果 表明,在 70 ℃和相同的 H₂O₂ 用量下两种离子液体都能被完全转化,降解反应遵循一级动力学,降解过 程都涉及阳离子被・OH自由基攻击开环并转化为简单的有机酸,但咪唑鎓和吡啶鎓阳离子离子液体的 TOC 转化率分别为 54%和 44%。Siedlecka 等^[17]也报告了类似的结论。结果表明,反应 90 min 后,1-丁基-3-甲基吡啶的降解率为 92%,而 1-丁基 3-甲基咪唑的降解率超过 97%,说明咪唑阳离子更容易被 降解,吡啶阳离子比咪唑阳离子具有更高的稳定性。

Siedlecka 等^[21]还研究了咪唑阳离子 N 位上从丁基到辛基的 N 烷基长度的影响。结果表明,具有 丁基烷基链的咪唑阳离子的降解率可以达到 97%,而辛基咪唑阳离子的降解率只有 68%。因此,降解 程度取决于阳离子的类型和烷基链长;而且,烷基链从 4 个碳增加到 8 个碳对降解率的影响比将阳离子 从咪唑改为吡啶还更大。Domínguez 等^[22]也观察到了类似的结果。在相同的 pH 值(pH=3)、温度(70 ℃),以及相同离子液体的初始浓度(1 000 mg • L⁻¹)和 H₂O₂ 和 Fe³⁺ 加入量下,TOC 去除率率从烷基 侧链长度为 2 个碳的 65%降低到 16 个碳的 50%。

Siedlecka 等^[23]通过对 1-丁基-3-甲基咪唑鎓不同盐类的比较,研究了阴离子对其降解效率的影响。 结果表明:当阴离子和咪唑鎓阳离子同时与活性·OH自由基反应,或者阴离子可能与亚铁离子或铁离 子发生络合等复杂反应时,离子液体的降解速率降低。在相同的 pH 值(pH=3.5)、温度(25 ℃),以及 在相同离子液体的初始浓度(1 mmol·L⁻¹)和 H₂O₂ 铁离子加入量下,氧化速率的顺序分别为 Cl⁻ > C(CN)₃⁻ >CF₃SO₃⁻,并遵循准一级动力学模型。Domínguez 等^[22]也研究了 1-丁基-3-甲基咪唑中不同 阴离子 对氧化速率的影响。结果表明,氧化速率的顺序为[CH₃SO₃]⁻ > [CH₃SO₄]⁻ > Cl⁻ > [CH₃CO₂]⁻。

Cheng 等^[24]研究了 1-乙基-3-甲基咪唑盐阴离子影响。结果表明:不同阴离子降解率的顺序为 CH₃SO₃⁻=PF₆⁻>CF₃SO₃⁻> CF₃COO⁻=CH₃COO⁻,三氟乙酸盐和乙酸盐的降解率最低,这是因为乙 酸根和三氟乙酸根阴离子与铁催化剂之间发生了较强的相互作用。然而,阴离子 CH₃SO₃⁻和 CF₃SO₃⁻ 对离子液体降解的影响并不显著,这是因为它们与铁催化剂的相互作用较弱。Cheng 等^[24]还研究了温 度的影响,结果表明,343 K 时一级反应速率比 298 K 时提高了 18 倍,温度从 298 K 提高到 343 K,阳离 子降解率从 28%提高到 96%。

2024 年

Gomez-Herrero 等^[25]研究了芬顿和生物氧化联合去除 1-乙基-3-甲基咪唑氯盐。结果表明,在 70 ℃,pH=3 和 Fe³⁺/H₂O₂=0.1 的条件下,初始浓度为 1 g・L⁻¹的离子液体阳离子能够完全被去除,但 TOC 去除率只能达到 50%;然后再进行生物好氧氧化处理,TOC 去除率可提高到 90%,这为离子液体 的彻底去除指明了方向。即先采用高级氧化法使离子液体降解为毒性较小的小分子物质并提高其可生 化性,然后再采用常规的生物法可以深度去除其 TOC。

Ren 等^[26]采用过氧二硫酸钠(PS)降解 1-烷基-3-甲基咪唑溴盐。结果表明,该离子液体在 60 ℃和 2 h 的条件下被完全降解,一级反应速率系数随着温度、PS 的浓度和废水 pH 值的增大而增大,但侧链 长度对速率系数的影响不明显。

过氧化氢的成本高且运输和存储过程中存在泄漏和爆炸风险。因此,最近 Fedorov 等^[27]研究了用 过碳酸钠(Na₂CO₃•1.5H₂O₂)作为 H₂O₂ 安全廉价的替代品降解离子液体,且其可避免酸碱调节并拓 宽了 pH 值的操作范围。

将催化剂负载或固定到合适的载体上的非均相类芬顿催化剂,可拓宽 pH 值的适用范围,并减少甚 至避免铁污泥的产生,是近年来芬顿高级氧化技术的主要发展方向之一。

Munoz 等^[28]将氧化铁负载在商用石墨(质量分数为 0.4%)和氧化铝上,用于降解咪唑鎓离子液体 并考察烷基侧链的影响。结果表明:在 90 ℃,pH=3 及相同 H₂O₂ 和催化剂用量下,当烷基链的长度从 2 个碳原子改变为 16 个碳原子时,矿化度降低(TOC 降解率从 44%降低到 33%),以石墨为载体的反应 速率更大,但 Fe₂O₃/c-Al₂O₃ 更稳定,铁的浸出几乎可以忽略不计。

Mena 等^[29]将 Fe 负载在通过污水污泥热解和水热碳化获得的碳质材料上,在 80 °C,pH=3 及催化 剂用量为 0.133 kg・h・mol⁻¹,H₂O₂ 用量为化学计量剂量下催化降解 1-丁基-3-甲基咪唑鎓乙酸盐。 结果表明:在运行 80 h 的长时间实验中,用 FeCl₃ 热解制备的催化剂表现出最好的活性和稳定性。Mena 等^[30]还研究了阴离子的性质和烷基侧链的大小对 Fe₂O₃/c-Al₂O₃ 催化剂降解 1-丁基-3-甲基咪唑盐 的影响。结果表明,氯阴离子、乙酸阴离子和双(三氟甲烷磺酰基)酰亚胺阴离子的准一级速率常数没有 明显的差异,烷基侧链为 4~10 个碳原子的氯化咪唑离子液体的动力学常数也非常相似,但矿化程度随 着链长而增加,TOC 降解率从 40%增加到 50%。

Zhu 等^[31]通过缩合的 Fukui 函数($f_{\bar{A}}$)定量预测了甲基咪唑鎓离子液体的结构对芬顿降解反应的 影响和降解途径。结果表明,非质子型离子液体[DMIM][BF₄]和[TMIM][BF₄])比质子型离子液体 [HHIM][BF₄]和[HMIM][BF₄]更耐•OH攻击。这是因为去质子作用降低了攻击点的 $f_{\bar{A}}$ 值。结构 对称性增加了总有机碳(TOC)还原的初始速率,三甲基取代的[TMIM][BF₄]]显示出最低的 TOC 去 除效率和初始速率,这可能是因为 C2-甲基取代大大削弱了 C2 的 $f_{\bar{A}}$ 值,更多的甲基取代导致离子液 体的芬顿反应性变弱,但氧化途径增多。

Liu 等^[32]以霍夫曼型 MOF ([Fe]pyrazine[Ni(CN)₄])通过碳化合成了 FeNi 纳米合金颗粒限域在 碳纳米管(CNT)中的非均相类芬顿催化剂,并用于活化过氧二硫酸盐 (PS)降解废水中 1-丁基-3-甲基 咪唑氯化物离子液体。结果表明,所合成的催化剂(氧化剂的化学计量效率(RSE)=污染物降解摩尔 数/氧化剂摩尔数=0.038 8)比 Fe₃O₄ 具有更高的催化活性(RSE=0.015 5)。

Jiang 等^[33]以铜网(CM)作为 Cu 源在其上面直接生长蠕虫状 Cu₂S,制备了一种 3D 分层核壳结构 的类芬顿催化剂 Cu₂S@CM(CSCM)。与其前体 CuO@CM 相比,CSCM 在活化过氧化氢氧化降解 1-丁基-3-甲基咪唑型离子液体([C₄MIM])中表现出极高的催化活性。因为其表现出更优越的电化学性 能和反应位点,且 CSCM 降解[C₄MIM]的活化能 E_a=8.6 kJ·mol⁻¹,比目前已报道的文献值都小。此 外,CSCM 还显示出在 NaCl 和海水存在下活化过氧化氢降解[C₄MIM]的高活性和稳定性。

传统芬顿氧化法虽然已在处理其他污染物方面得到了实际应用,但存在 pH 值操作范围太窄而需 要进行酸碱调节,有大量含铁污泥产生以及废水中有铁离子浸出的缺点,极大的限制了它的应用范围。 因此,近年来研究者主要聚焦类芬顿氧化法的研究,其能经济高效地降解离子液体的阳离子,但还存在 矿化率偏低以及催化剂的循环稳定不够高等问题。

3.2 电助氧化法

近几十年来,电氧化技术由于其操作简单、去除有害污染物的效率高,已成为一种越来越有前途的

替代传统废水处理的新技术。该技术不用使用化学试剂,被视为"绿色技术"。水在阳极表面发生氧化 反应产生的羟基自由基可以直接氧化难降解的污染物,且在某些条件下还可能形成过氧化氢或臭氧等 氧化性物质,这些氧化性物质也能够直接或间接氧化难降解的污染物。相关的反应式^[34]为

$$H_2 O \rightarrow OH + H^+ + e^-$$
 (1)

$$2 \cdot \mathrm{OH} \to \mathrm{H}_2\mathrm{O}_2 \tag{2}$$

$$H_2O_2 \rightarrow O_2 + 2H^+ + 2e^-$$
 (3)

$$O_2 + O \rightarrow O_3 \tag{4}$$

在电催化氧化处理过程中,如果废水中存在氯化物或硫酸盐等电解质,还会导致形成次氯酸根和过 二硫酸根等有助于电氧化过程的强氧化性物质。其反应式^[35]为

$$2\mathrm{Cl}^{-} \rightarrow \mathrm{Cl}_{2} + 2\mathrm{e}^{-} \tag{5}$$

$$Cl_2 + H_2 O \rightarrow HOCl + H^+ + Cl^-$$
(6)

$$HOCI \rightleftharpoons DH^+ + OCI^- \tag{7}$$

$$2SO_4^{2-} \to S_2O_8^{2-} + 2e^-$$
(8)

$$2SO_4^{2-} + OH \rightarrow S_2O_8^{2-} + HO^- + e^-$$
 (9)

电催化氧化法还可以与均相和非均相芬顿体系组合。该方法的阳极可以直接氧化难降解的污染物,而碳阴极可以产生过氧化氢,添加 Fe²⁺盐后可以引发芬顿反应,已被证明是一种非常高效的组合,被称为电芬顿氧化法^[36]。如果进一步使用紫外线辐射使反应介质中形成的 Fe(III)络合物脱羧,则称为光电芬顿氧化法^[37]。由各种材料制成的阳极,包括 Pt,IrO₂,石墨,PbO₂,SnO₂,TiO₂和掺硼金刚石(BDD),已用于离子液体的电催化氧化降解^[38-39]。目前,已对离子液体成分(阳离子和阴离子)、电极材料、温度,以及电解质类型和浓度等的影响进行了研究。

Siedlecka 等^[40]于 2012 年率先报道了以 PbO₂ 作为阳极(145 cm²), Na₂SO₄ 作为电解质(87 mmol·L⁻¹),通过阳极氧化降解咪唑离子液体的开创性工作。结果表明,咪唑阳离子能够被完全去除,化学需氧量(COD)的去除率可以达到 69%~97%。烷基侧链的长度从 4 个碳原子增加到 8 个碳原子 会导致降解率降低,侧链中若插入醚基会使离子液体更难氧化降解,导致电流密度需从 4 A・h・L⁻¹增加到 8.5 A・h・L⁻¹。Mena 等^[41]使用 BDD 作阳极, H₂SO₄ 作为电解质(3 g・L⁻¹)降解 4~10 个碳原子的烷基侧链的咪唑离子液体,获得了类似的结果。

Pieczynska 等^[42]报道了使用 BDD 阳极、Na₂SO₄ 电解质(3.5g·L⁻¹)对各种离子液体进行降解时 的拟一阶速率系数。结果表明,速率系数随着链长从 4 个碳原子增加到 6 个碳原子而增加(在 25 ℃和 pH=6下,0.0197~0.0222min⁻¹),咪唑离子液体明显比吡啶离子液体更难降解(速率常数分别为 0.0296和 0.0349min⁻¹)。此外,废水的 pH 值接近中性时离子液体的降解率最高,而在 25~60℃范 围内提高温度并没有使降解率得到明显的改善。

Fabianska 等^[43]研究了 6 种不同阴离子对咪唑鎓离子液体降解的影响。结果表明,降解从易到难 的顺序为:氯化物>溴化物>四氟硼酸盐>六氟磷酸盐>三氟甲磺酸酯>对甲苯磺酸盐。氯阴离子的 存在改善了咪唑鎓阳离子的降解,可能是在电催化氧化过程中形成了氯气、次氯酸和次氯酸离子等对有 机污染物降解具有活性的中间产物,而对甲苯磺酸盐阴离子由于也要竞争氧化降解而阻碍了阳离子的 降解。Mena 等^[41,44]在以 1-丁基-3-甲基咪唑为阳离子,氯、乙酸盐或双(三氟甲磺酰基)酰亚胺为阴离子 的离子液体阳极氧化降解中也获得了类似的结果。同时,研究还发现在没有电解质的情况下,由于竞争 性氧化,乙酸根阴离子的降解效果最差,而双(三氟甲磺酰基)酰亚胺阴离子是难降解的。

Siedlecka 等^[45]研究了不同阳极材料对离子液体的阳极氧化降解的影响。结果表明,IrPt 和 IrO₂ 阳极效果较差,因为它们会迅速失去活性;相反,PbO₂ 对降解离子液体是有效的,但不能完全去除芳香 族成分,而 BDD 阳极的活性最好,可实现了高达 80%的 COD 去除率。Bouya 等^[46]使用 SnO₂ 和 BDD 作阳极,也观察到 BBD 阳极对离子液体的降解最有效,COD 去除率超过了 85%。

Mena 等^[41,47] 对紫外线和超声波(US)提高阳极氧化效率的能力进行研究。结果表明,阳极氧化组 合以上两种技术都能提高离子液体阳离子的降解速率,特别是与 US 组合降解 1-丁基-3-甲基咪唑鎓乙 酸酯时,由于产生大量羟基自由基,使一级速率系数从 1.80×10⁻³ min⁻¹增加到 1.15×10⁻² min⁻¹。 Garcia-Segura 等^[48]以 BDD 为阳极,空气扩散电极为阴极,比较了阳极氧化、电芬顿和光电芬顿对 1-丁基-4-甲基吡啶鎓氯化物和 1-乙基-3-甲基咪唑鎓氯化物的降解。结果表明,这三种方法对吡啶离子 液体的溶解性有机碳(DOC)的降解结果基本相似,而对咪唑离子液体,电芬顿和光电芬顿的处理效果 比阳极氧化更有效。两种离子液体的单位电流矿化效率顺序为:电氧化<电芬顿<光电芬顿。后两个 方法除了阳极氧化外,还有铁催化 H₂O₂ 分解产生羟基自由基的贡献。由于 Fe³⁺比 Fe²⁺更容易与反应 过程中产生的草酸中间体形成配合物而影响电芬顿的降解效率,这种配合物在紫外线照射下会迅速消 失,因此光电-芬顿过程的矿化效率更高。

Peziak-Kowalska 等^[49]还观察到,电芬顿法对二癸基二甲基铵(4-氯-2-甲基苯氧基)乙酸盐的矿化 度远高于碳毡阴极和 Pt 电极的阳极氧化法(80%对 25%)。Bocos 等^[50]用 BDD 阳极和碳毡阴极研究 了各种电解质对三氟甲磺酸 1-丁基-3-甲基咪唑鎓电芬顿降解的影响。结果表明,硝酸盐是最佳的电解 质,其次是硫酸盐和氯化物。即使在没有电解质的情况下,当离子液体的阴离子为氯阴离子时,由于其 会被羟基自由基氧化转化为氯酸盐和高氯酸盐而消耗掉一部分羟基自由,从而使阳离子的降解减少。 当电解质浓度达到最高时(0.075 mmol·L⁻¹ NaNO₃),矿化率可达到 99%。Arellano 等^[51]的研究结 果表明,BDD 在 1-丁基-1-甲基吡咯烷的电芬顿降解中比 Ti₄O₇ 薄膜阳极更有效,几乎可以使离子液体 完全矿化。Arellano 等^[52]在 1-丁基-1-甲基吡咯烷鎓氯化物的阳极和电芬顿氧化中使用了过氧一硫酸 盐(PMS),结果表明添加 Fe²⁺能起到积极的作用。

Bocos 等^[53]使用海藻酸铁珠或凝胶球和针铁矿-聚乙烯醇-海藻酸盐珠作为催化剂,研究碳毡阴极和 BDD 阳极的非均相电芬顿降解咪唑离子液体。结果表明,咪唑离子液体几乎完全被矿化,但随着其烷基侧链长度从 2 个碳原子增加到 6 个碳原子,降解率降低,分别为 90%和 80%。然而,Poza-Nogueiras 等^[54]在将催化剂浓度从 5 g·L⁻¹降至 1 g·L⁻¹后获得了更好的结果,因为 Fe²⁺与催化剂表面的羟基自由基发生了更有利的副反应。Arellano 等^[51]研究了不同的铁矿物,包括黄铁矿、针铁矿和磁铁矿在电场下对 PMS 的活化,并用于降解 1-丁基-1-甲基吡咯烷鎓氯化物,结果表明黄铁矿活性最高且最稳定。

Diez 等^[55]以膨胀珍珠岩载体制备了含 Fe 和 TiO₂ 双功能的电芬顿和光催化氧化催化剂,并用于降 解 1-丁基-2,3-二甲基咪唑氯化物离子液体。结果表明,2 h 内对离子液体的去除率和 4 h 内对 TOC 的 去除率,UV/TiO₂-Perlite 分别只有 40%和 0%,UV/Fe-Perlite 电芬顿分别可以达到 80.8%和 64%, UV/TiO₂-Perlite 光电芬顿分别能达到 82.0%和 61.2%,UV/Fe-TiO₂-Perlite 光电芬顿则分别能达到 93.2%和 81.0%。说明含 Fe 和 TiO₂ 双功能光电芬顿催化剂的效果最好,而且能够实现很高的矿化 率。这是因为电芬顿能够高效降解离子液体,而光催化氧化则能够进一步氧化降解由电芬顿分解的中 间产物,并且光辐射能够迅速分解铁与中间产物形成的络合物,使 Fe²⁺得到再生,显示出将光电芬顿 3 种高级氧化技术组合一起的显著优势。

Arellano 等^[51]以 BDD 或 Ti₄O₇为阳极,碳毡为阴极,加入 Fe²⁺组成电芬顿氧化预处理 1-丁基-1-甲 基吡咯烷氯化物,然后使用细菌和真菌联合体对如预处理后的废水进行生化处理。结果表明,电芬顿预 处理能够使离子液体的去除率达到 98%;进一步生化深度处理后,TOC 和羧酸的去除率分别达到 78% 和 67%,而只采用生化处理(未经电芬顿预处理)时 TOC 几乎没有降低,也未检测到有羧酸生成。

从以上研究可以看出,阳极氧化能够有效地降解离子液体。在大多数情况下,阳离子可以被完全去除,矿化率也很高,而 BDD 阳极已被证明是最有效的。咪唑离子液体比吡啶离子液体更不容易降解,降 解速率随着烷基侧链长度的增加而增加。由于对羟基自由基的竞争,有机阴离子的存在会大大阻碍阳 离子的降解,而与芬顿氧化或 UV 辐射和 US 的组合能显著提高阳极氧化的降解能力。

3.3 光助氧化法

光助氧化过程是在紫外线/可见光和(或)催化剂的联合作用下产生羟基或其他含氧自由基以降解 污染物的过程。可以根据所使用的光源、催化剂和氧化剂种类进行分类,如紫外线辐射与过氧化氢 (UV/H₂O₂)、紫外线辐射与过氧二硫酸盐(UV/PS)、紫外线辐射与氯(UV/氯)等。

在 UV/H₂O₂ 过程中,足够能量的紫外辐射能破坏过氧化氢分子,产生·OH自由基^[56]。在 UV/PS 过程中,先形成硫酸根自由基,其还能与水分子反应产生羟基自由基。相应的反应式^[57]为

 $S_2 O_8^{2-} + h\nu \rightarrow 2 \cdot SO_4^{-}$

(10)

$$\cdot \mathrm{SO}_4^- + \mathrm{H}_2\mathrm{O} \to \mathrm{SO}_4^{2-} + \cdot \mathrm{OH} + \mathrm{H}^+$$
(11)

$$\cdot \mathrm{SO}_4^- + \mathrm{HO}^- \rightarrow \mathrm{SO}_4^{2-} + \cdot \mathrm{OH}$$
 (12)

光催化氧化需要使用半导体材料,通常为 TiO₂。在光催化氧化过程中,电子首先被激发并转移到 导带,在价带中留下电荷不足的区域("空穴",h⁺),然后光生 e⁻和 h⁺与溶解氧发生一系列反应生成羟 基自由基和超氧自由基等活性物质,如图 4 所示^[4]。相应的反应式^[58]为

$$TiO_2 + h\nu \rightarrow e^- + h^+$$
(13)

$$h^{+} + H_2 O \rightarrow OH + H^{+}$$
(14)

$$e^{-} + O_2 \rightarrow O_2^{-} \tag{15}$$

$$2 \cdot O_2^- + 2H_2O \rightarrow 2 \cdot OH + 2HO^- + O_2$$

$$\tag{16}$$



图 4 光催化降解离子液体机理示意图[4]

Fig. 4 Schematic diagram of photocatalytic degradation mechanism of ionic liquids^[4]

将金属颗粒(Pt,Au或 Pd)结合到 TiO₂ 表面上,可以提高目标污染物的光催化分解效率或降低光能需求^[59]。

光助氧化的主要优点在于温和的操作条件,通常是环境温度和压力,而其主要缺点是紫外线辐射源 的成本较高,这虽然可以通过使用太阳能来降低,但需要合适的催化剂^[60]

Stepnowski 等^[61]比较了三种常见的光氧化过程(紫外线辐射、UV/H₂O₂ 和 UV/TiO₂ 光催化)在 室温下分解咪唑鎓离子液体的效果。结果表明,UV/H₂O₂ 是最有效的,光催化比单独使用紫外线略有 效,1-乙基-3-乙基咪唑鎓最难降解。Banic 等^[62]研究了 TiO₂/H₂O₂,TiO₂,Fe/TiO₂/H₂O₂ 在黑暗和紫 外线辐射下对咪唑基离子液体的降解。结果表明,UV/TiO₂/H₂O₂ 的效率最高,而在非辐射的过程中 Fe/TiO₂ H₂O₂ 的效果最好。UV 辅助体系的降解能力按 UV/TiO₂/H₂O₂ < UV/TiO₂ < UV/TiO₂ < UV/Fe/TiO₂/H₂O₂ < UV/H₂O₂ <UV 的顺序降低。

Calza 等^[63]研究发现,对于不同的吡啶离子液体,直接光解的贡献可以忽略不计,然而当使用 200 mg · L⁻¹的 TiO₂ 对相同的离子液体进行光催化处理时,吡啶鎓阳离子可以在不到 2 h 的时间内被完全 去除。da Silva 等^[64]研究结果表明,采用 UV/TiO₂ 在 TiO₂ 用量为 700 mg · L⁻¹时,氯化 1-丁基-3-甲 基咪唑的降解率可达到 50%,而仅使用紫外线辐射时降解率只有不到 7%。

Morawski 等^[65]研究了吡啶鎓、咪唑鎓和鏻盐等不同种类离子液体的降解情况。结果表明,最容易 降解的是那些具有长烷基链取代基的离子液体,而具有羟基的季铵离子液体(胆碱衍生物)比具有乙酰 基的更难降解;季磷阳离子最容易被光催化降解(85%~97%),而吡啶鎓和咪唑鎓离子液体的降解程度 因操作条件(33%~73%)而异。

Pati 等^[66]研究了不同种类的离子液体(咪唑鎓、吡啶鎓和哌啶鎓)在 H₂O₂,PS 和氯及紫外线辅助 下的降解情况。结果表明,在 1 mmol·L⁻¹的 H₂O₂ 实验中,只有羟基自由基是反应物种,在照射 20 min 后,1-丁基-3-甲基咪唑鎓和 1-丁基-3-甲烷吡啶鎓(10 mmol·L⁻¹)的去除率分别为 43%和 14%;而 在 UV/PS(1 mmol·L⁻¹ K₂S₂O₈)实验中,由于硫酸根自由基的作用,阳离子的浓度下降得更快。阳离 子很容易与羟基和硫酸根反应,二级反应速率系数分别为 1.2×10⁹~8.5×10⁹ 和 0.08×10⁹~1.7× 10⁹ L·(mol·s)⁻¹。最后,在 UV/氯实验中可以观察到通过自由基中间体与游离氯的反应可以形成多 种氯基自由基物种(Cl⁻,ClO⁻等)。

Pati 等^[67]还测定了 UV/H₂O₂,UV/PS 和 UV/氯降解 1-丁基-3-甲基咪唑鎓过程中羟基自由基的 稳态浓度,UV/H₂O₂ 系统在 8.3×10⁻¹⁴~2.2×10⁻¹³ mol·L⁻¹之间,而在 UV/PS 和 UV/氯的情况下 羟基自由基的浓度更高(分别为 2.5×10⁻¹³,7.6×10⁻¹³ mol·L⁻¹)。

在光催化处理中,催化剂起着至关重要的作用。在离子液体的降解中,TiO₂是最常用的催化剂。 Gomez-Herrero等^[68]研究结果表明,在 0.25 g·L⁻¹的 TiO₂和 600 W·m²太阳辐射下进行光催化处 理,氯化 1-丁基-4-甲基吡啶鎓和氯化 1-己基-3-甲基咪唑鎓可以在 24 h 内完全转化,TOC 去除率分别 为 28%和 35%,吡啶阳离子比咪唑阳离子更容易降解。

Spasiano 等^[69]研究结果表明,UV/H₂O₂ 在 pH=8.5 时,链长从 2 个碳原子增加到 4 个碳原子的 二级反应速率系数从 3.69×10⁹ L•(mol•s)⁻¹增加到 5.52×10⁹ L•(mol•s)⁻¹。同样,Pati 等^[67]也 观察到,当烷基链长从 2 个碳原子增加到 10 个碳原子时,二级反应速率常数从 2.57×10⁹ L•(mol• s)⁻¹增加到 8.47×10⁹ L•(mol•s)⁻¹。Calza 等^[63]研究了紫外光催化对吡啶鎓类离子液体的降解。 结果表明,烷基链长从 2 个碳原子增加到 6 个碳原子时,阳离子完全降解所需的时间从 120 min 缩短到 30 min,可以更快地形成反应的中间体。

阴离子对离子液体光催化降解的影响也引起了人们的关注。Morawski 等^[65]的研究结果表明,咪 唑类离子液体降解速率的顺序为:三氟甲磺酸酯<四氟硼酸盐<六氟磷酸盐<L-乳酸盐<DL-乳酸盐。 Calza 等^[63]的研究结果表明,氯化物或四氟硼酸盐阴离子的吡啶鎓离子液体通过光催化降解的程度相 似,但溴化物离子液体(1-丁基溴化吡啶鎓或 1-丁基-3-甲基溴化吡啶啉鎓)比它们更难降解。Bedia 等^[70]的研究结果表明,含有三(五氟乙基)三氟磷酸阴离子的咪唑鎓离子液体比含有氯化物和四氟硼酸 盐的离子液体更不容易矿化(30%对 80%)。

Ahmad 等^[71]研究了通过掺杂金和铁纳米粒子来降解氯化 1-丁基-3-甲基咪唑鎓,从而增强 TiO₂ 的 光催化活性.结果表明,在 60 min 的反应时间内,TiO₂/Au 使光催化降解比非掺杂 TiO₂ 提高了 7 倍, 比 TiO₂/Fe 提高了 3.3 倍。TiO₂/Au 催化剂光催化效率的提高是由于掺杂 Au 时 TiO₂ 的肖特基缺陷 增强,而在紫外线下肖特基缺陷会导致产生大量的·O₂ 和·OH自由基。

Kaabeche 等^[72]研究了 ZnO 和 TiO₂(P25)对溴化 1-己基吡啶的光催化降解,结果表明在 120 min 内 UV-ZnO(94%)的矿化速度比 UV-TiO₂(88%)快,符合准一级反应动力学模型,V-ZnO 的速率常数 在碱性条件下最高(k=0.096 1 min⁻¹,pH=11),UV-TiO₂ 在酸性条件下的速率常数最高(k=0.128 min⁻¹,pH=3)。

da Silva 等^[64]研究了二氧化硅负载的钛催化剂(SiTi)在紫外和可见光照射下光催化降解咪唑鎓。他们还研究了掺镁(1%~25%)对二氧化硅负载钛催化剂(Mg/SiTi)的影响。结果表明,催化剂 Mg/SiTi 比商业 TiO₂ 催化剂的活性更高,且随着催化剂中 Mg 掺杂量的增加,离子液体在 60 min 内的去除率从 50%(1%的 Mg/SiTi)增加到 65%(25%的 Mg/SiTi)。

Rauta 等^[73]以 Ag 掺杂 SnO₂ 制备了纳米粒子光催化剂 Ag-SnO₂,并用于降解季铵盐离子液体。结果表明,光学带隙从原来的 3.92 eV 降低到 3.05 eV,5%的 Ag-SnO₂ 催化剂(0.6 g • L⁻¹)在紫外-可见 光下照射 300 min 能够降解所有污染物。Zhang 等^[74]以在可见光区域具有局域表面等离子体共振 (SPR)的等离子体金属 Ag 与 Pd 合成了核壳结构的光催化剂 Pa@Ag,活化过硫酸钾构成一种新型的 光催化芬顿氧化法,并用于降解 1-丁基-3-甲基咪唑溴盐。结果表明,在 420 nm 可见光下照射 12 h,离 子液体的降解率可达到 74.21%。

Guo 等^[75]研究了采用模拟太阳光(氙灯,Xe)活化高碘酸盐(KIO₄,PI),以降解 1-己基-2,3-二甲基 咪唑溴化物([HMIM]Br)。结果表明,在强酸/强碱或各种非目标无机离子的恶劣条件下,阳离子 ([HMMIM]⁺)的去除率都能达到 90.0%以上,但溴离子没有被氧化为致癌物溴酸盐 BrO₃⁻。Xe 灯/ PI 系统中[HMMIM]⁺的降解有四种途径,包括 C-N 和/或 C-C 键断裂、羟基化、单氧和双氧转移反 应,其中激发态 PI(PI *)起着至关重要的作用。PI * 衍生的 •OH自由基和 PI * 直接介导的氧转移分别 占[HMMIM]⁺降解的 73%和 21%,直接光解的贡献只有 6%。

Wang 等^[76]研究了用模拟太阳光和自然光活化 PS 降解 1-乙基-3-甲基咪唑氯盐。结果表明,在 25 ℃和 4 h 内离子液体的降解率达到了 99%。DFT 计算结果表明, [C₂ MIM]Cl 首先被攻击的主要位点

433

是咪唑环上的 C 原子,其次是烷基侧链, [C₂ MIM] Cl 的降解主要是通过咪唑环氧化、C-N 键断裂和消除反应进行。Ameur 等^[77] 研究了 1-己基-3-甲基咪唑氯盐([HMIM]Cl)在模拟太阳光/ZnO 和模拟太阳光/ZnO/氧化剂(H₂O₂ 和 S₂O₈²⁻)中的降解。结果表明,添加过氧化氢不仅不会提高[HMIM]Cl 的降解速率,还会显著降低速率系数,与光催化过程相比,添加 Na₂S₂O₈(在 10⁻⁴ ~ 10⁻² mol·L⁻¹的范围内)显著提高了[HMIM]Cl 的降解速率。刘娇琴等^[78]采用 UV/Na₂CO₃ · 1.5H₂O₂ 技术去除水中 24 种咪唑类离子液体。结果表明,当过碳酸钠与离子液体的摩尔浓度(100 μ mol·L⁻¹)比为 10 : 1 时,1-辛基-3 甲基咪唑溴盐在 5 min 之内几乎可以 100% 被降解, pH 值对降解有重要的影响,当 pH=8 时, 一级降解速率系数最高,为 0.011 4 s⁻¹。

Dmitri 等^[79]以过氧一硫酸盐(PMS)和过氧二硫酸盐(PDS)作氧化剂,研究了脉冲电晕放电(PCD) 和紫外光解与过硫酸盐结合对咪唑型离子液体的降解。结果表明,PCD,PCD/氧化剂和 UV/氧化剂都 能够使离子液体完全降解,降解率按降序为:[EMIM]Cl >[OMIM]Cl >[EMIM]Br。这说明侧链烷 基越长越难降解,溴阴离子比氯阴离子离子液体难降解;UV 对 PMS 和 PDS 都具有强烈的活化作用, 表现出很高的降解效率,但只有增加氧化剂的用量才可以使离子液体完全降解。UV/PDS 氧化过程中 硫酸根自由基是主要的活性物质,而在 UV/PMS 氧化过程中,羟基自由基与硫酸根自由基的作用都相 当明显。从脉冲重复频率变化时的氧化效率差异可以看出,在 PCD 过程中臭氧和其他可能的长寿命氧 化剂参与了离子液体的氧化,脉冲频率较低时氧化效率更高,这是因为长寿命的氧化剂可以在脉冲之间 的较长时间内充分发挥其氧化潜力。在碱性介质中,由于离子液体的阳离子与羟基阴离子中和形成的 中性分子更容易受到 ROS,羟基自由基和臭氧的亲电攻击,从而提高了 PCD 的氧化降解效率。在 PCD 中添加氧化剂的作用不明显,有时还反而会降低其能量效率。PCD 和 UV/PDS 对[EMIM]Cl 和 [EMIM]Br 降解的能量效率非常相似,分别约为 54 和 26 mmol·kW·h⁻¹,而对于[OMIM]Cl,UV/ PDS 的能量效率比 PCD 高 1.42 倍。

总之,光助降解离子液体是有效的。一般来说,使用紫外线辐射比太阳光更容易矿化。矿化的程度 与离子液体的种类和操作条件有关,差别较大,咪唑鎓和鏻阳离子更容易被紫外线和太阳光辐射降解。 此外,尽管目前还没有普遍的共识,但离子液体的烷基链的长度增加似乎会导致其更容易被降解。

4 存在的问题与展望

离子液体是一类新兴材料,在各个领域都有潜在的应用。但由于其生物毒性、水溶性、不可降解性, 离子液体被认为是一类持久污染物。因此,必须高度重视从工业废水中去除或降解离子液体。大量的 研究表明,类芬顿氧化、电助氧化和光助氧化等高级氧化技术是处理受离子液体污染废水的非常有应用 前景的方法,其降解和矿化程度与离子液体的结构和性质关系最为密切。其中电助氧化技术降解率和 矿化率都最高,但其处理成本也是最高的,且电助氧化过程中可能产生一些有毒的中间体,对后续的生 物法深度氧化处理可能产生不利的影响;光助氧化特别是自然太阳光助氧化是目前的研究热点,对中间 产物的矿化率较高,但其降解缓慢、所需时间较长,目前降解效率最低,还亟待开发更加高效的催化剂; 类芬顿氧化法是一种降解率高、成本低的氧化降解处理废水中离子液体的新技术,但其矿化率不高,催 化剂的稳定性还有待进一步提高和实际应用的证实。

为此,对该领域今后的研究提出如下几点建议:

1) 应深入系统研究离子液体及中间产物毒性,特别是其毒性与结构的关系,并以此为指导合成、生产和应用无毒或毒性低易降解的离子液体。

2)目前对离子液体的降解研究还十分有限,阳离子主要集中在咪唑、吡啶和吡咯基,阴离子主要集 中在氯盐和溴盐。所以应更加全面研究各种阴阳离子的降解,如包括铵基或膦基等脂肪族的阳离子,包 括醋酸盐、硫酸盐、磺酸盐、磷酸盐、硼酸盐、酰亚胺盐和水杨酸盐等阴离子,特别是采用电助和光助的氧 化降解。

3) 应深入研究离子液体在各种高级氧化过程中的降解途径、降解机理,以及催化剂结构和性质与 离子液体降解性能之间的构效关系,并以此为指导设计制备更加经济高效的催化剂。

4) 类芬顿氧化应着重研究如何提高离子液体的矿化率和催化剂稳定性,电催化氧化应着重研究如何降低能耗,光催化氧化应着重研究如何提高离子液体的降解效率。

5)离子液体的降解主要经历阳离子(包括某些特殊的阴离子)的分解和中间产物的进一步分解及 矿化两个不同的过程。因此,将各种氧化技术组合使用,如电芬顿、光电芬顿,或与生物氧化联合,可以 取长补短,充分发挥各种氧化技术在分解和矿化过程中的优势作用,是今后研究的重点。

6) 应深入系统水基质对 AOP 性能的影响和实际工业废水中离子液体的氧化降解规律,为高级氧化技术降解离子液体的实际应用提供更加可靠的理论和技术支撑。

参考文献:

- [1] REN Huiru, QIAN Hengli, HOU Qidong, et al. Removal of ionic liquid in water environment: A review of fundamentals and applications[J]. Separation and Purification Technology, 2023, 310;123112(1-14). DOI:10.1016/j. seppur. 2023. 123112.
- [2] EGOROVA K S,KIBARDIN A V,POSVYATENKO A V,et al. Mechanisms of biological effects of ionic liquids: From single cells to multicellular organisms[J]. Chemical Reviews, 2024, 124(8): 4679-4733. DOI10. 1021/acs. chemrev. 3c00420.
- [3] MENA I F, DIAZ E, RODRIGUEZ J J, et al. An overview of ionic liquid degradation by advanced oxidation processes ses[J]. Critical Reviews in Environmental Science and Technology, 2022, 52 (13): 2844-2887. DOI: 10. 1080/ 10643389. 2021. 1896273.
- [4] ASHTAPUTREY S D, AGRAWAL P S. Fenton and photo-assisted advanced oxidative degradation of ionic liquids: A review[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2023, 30(47):103576-103601. DOI:10.1007/s11356-023-29777-y.
- [5] MATUSZEK K, PIPER S L, BRZECZEK-SZAFRAN A, et al. Unexpected energy applications of ionic liquids[J]. Advanced Materials, 2024, 2313023; 1-26. DOI:10.1002/adma. 202313023.
- [6] GAGANDEEP K, HARSH K, MEENU S, et al. Applications of ionic liquids: A comprehensive review[J]. Journal of Molecular Liquids, 2022, 351:118556(1-19). DOI:10.1016/j. molliq. 2022. 118556.
- [7] RANKE J,STOLTE S,STÖRMANN R, et al. Design of sustainable chemical products: The axample of ionic liquids
 [J]. Chemical Reviews, 2007, 107(6): 2183-2206. DOI: 10.1002/chin. 200736255.
- [8] SKLADANOWSKI A C, STEPNOWSKI P, KLESZCZYNSKI K, et al. AMP deaminase in vitro inhibition by xenobiotics: A potential molecular methods for risk assessment of synthetic nitro-and polycyclic musks, imidazolium ionic liquids and N-glucopyranosyl ammonium salts[J]. Environmental Toxicology and Pharmacology, 2005, 19(2): 291-908. DOI: 10. 1016/j. etap. 2004. 08. 005.
- [9] PERNAK J,GOC I,MIRSKA I. Anti-microbial activities of protic ionic liquids with lactate anion[J]. Green Chemistry,2004,6(7):323-329. DOI:10.1039/b404625k.
- [10] DOCHERTY K M, KULPA C F. Toxicity and antimicrobial activity of imidazolium and pyridinium ionic liquids
 [J]. Green Chemistry, 2005, 7(4): 185-189. DOI: 10.1039/b419172b.
- [11] STEPNOWSKI P,SKLADANOWSKI A C,LUDWICZAK A, et al. Evaluating the cytotoxicity of ionic liquids using human cell line HeLa[J]. Hum Exp Toxicol,2004,23(11):513-517. DOI:10.1191/0960327104ht4800a.
- [12] MATILDE V S, MATTEO O, ANDREA M, et al. In vitro screening of imidazolium and pyrrolidinium based ionic liquids toxicity on subcellular fractions of the Mediterranean mussel Mytilus galloprovincialis[J]. Environmental Toxicology and Pharmacology, 2023, 104:104305. DOI:10.1016/j. etap. 2023.104305.
- [13] CHO C W, JEON T C, PHAM T P T, et al. The ecotoxicity of ionic liquids and traditional organic solvents on microalga Selenastrum capricornutum [J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2008, 71(1):166-171. DOI:10. 1016/j. ecoenv. 2007. 07. 001.
- [14] BAILEY M M, TOWNSEND M B, JERNIGAN P L, et al. Developmental toxicity assessment of the ionic liquid 1butyl-3-methylimidazolium chloride in CD-1 mice[J]. Green Chemistry, 2008, 10(11):1213-1217. DOI: 10. 1039/ b807019a.
- [15] LI Xiaoyu, ZHOU Jing, YU Miao, et al. Toxic effects of 1-methyl-3-octylimidazolium bromide on the early embryonic development of the frog Rana nigromaculata [J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2009, 72(2):552-

435

556. DOI:10.1016/j.ecoenv.2007.11.002.

- [16] PRETTI C, CHIAPPE C, PIERACCINI D, et al. Acute toxicity of ionic liquids to the zebrafish (Danio rerio)[J]. Green Chemistry, 2006, 8(3): 238-240. DOI: 10.1039/B511554J.
- [17] SIEDLECKA E M, MROZIK W, KACZYNSKI Z, et al. Degradation of 1-butyl-3-methylimidazolium chloride ionic liquid in a Fenton-like system[J]. Journal of Hazardous Materials, 2008, 154(1/2/3): 893-900. DOI: 10. 1016/j. jhazmat. 2007. 10. 104.
- [18] DOMÍNGUEZ C M, MUNOZ M, QUINTANILLA A, et al. Kinetics of imidazolium-based ionic liquids degradation in aqueous solution by Fenton oxidation[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2018, 25: 34811-34817. DOI:10.1007/s11356-017-0459-3.
- [19] MUNOZ M, DOMÍNGUEZ C M, DE PEDRO Z M, et al. Ionic liquids breakdown by Fenton oxidation[J]. Catalysis Today, 2015, 240:16-21. DOI: 10.1016/j. cattod. 2014. 03. 028.
- [20] GOMEZ-HERRERO E, TOBAJAS M, POLO A, et al. Removal of imidazolium- and pyridinium-based ionic liquids by Fenton oxidation[J]. Environmental Science and Pollution Research International, 2018, 25(35): 34930-34937. DOI:10.1007/s11356-017-0867-4.
- [21] SIEDLECKA E M, GOLFBIOWSKI M, KACZYNSKI Z, et al. Degradation of ionic liquids by Fenton reaction; the effect of anions as counter and background ions[J]. Applied Catalysis B: Environmental, 2009, 91(1/2):573-579. DOI:10.1016/j. apcatb. 2009. 06. 029.
- [22] DOMINGUEZ C M, MUNOZ M, QUINTANILLA A, et al. Degradation of imidazolium-based ionic liquids in aqueous solution by Fenton oxidation[J]. Journal of Chemical Technology and Biotechnology, 2014, 89(8):1197-1202. DOI:10.1002/JCTB.4366.
- [23] SIEDLECKA E M,STEPNOWSKI P. The effect of alkyl chain length on the degradation of alkylimidazolium- and pyridinium-type ionic liquids in a Fenton-like system[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2009, 16: 453-458. DOI:10.1007/s11356-008-0058-4.
- [24] CHENG Huan, CHEN Guangshi, QIU Yuping, et al. Factors that influence the degradation of 1-ethyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate by Fenton oxidation[J]. RSC Advances, 2016, 6(64): 59889-59895. DOI: 10.1039/ c6ra12675h.
- [25] GOMEZ-HERRERO E, TOBAJAS M, POLO A, et al. Removal of imidazolium-based ionic liquid by coupling Fenton and biological oxidation[J]. Journal of Hazardous Materials, 2019, 365(5): 289-296. DOI: 10. 1016/j. jhazmat. 2018. 10. 097.
- [26] REN Tianlin, MA Xiwen, WU Xiaoqiong, *et al*. Degradation of imidazolium ionic liquids in a thermally activated persulfate system[J]. Chemical Engineering Journal, 2021, 412:128624(1-11). DOI:10.1016/j. cej. 2021.128624.
- [27] FEDOROV K,RAYAROTH M P,SHAN N S,et al. Activated sodium percarbonate-ozone (SPC/O₃) hybrid hydrodynamic cavitation system for advanced oxidation processes (AOPs) of 1,4-dioxane in water[J]. Chemical Engineering Journal,2023,141027. DOI:10.1016/j.cej.2022.141027.
- [28] MUNOZ M, DOMÍNGUEZ C M, DE PEDRO, et al. Degradation of imidazolium-based ionic liquids by catalytic wet peroxide oxidation with carbon and magnetic iron catalysts[J]. Journal of Chemical Technology & Biotechnology, 2016,91(11):2882-2887. DOI:10.1002/jctb.4904.
- [29] MENA I F, DIAZ E, MORENO-ANDRADE, et al. Stability of carbon-supported iron catalysts for catalytic wet peroxide oxidation of ionic liquids[J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2018, 6(5):6444-6450. DOI: 10.1016/j. jece. 2018. 09. 061.
- [30] MENA I F, DIAZ E, PEREZ-FARIAS C, *et al.* Catalytic wet peroxide oxidation of imidazolium-based ionic liquids: Catalyst stability and biodegradability enhancement[J]. Chemical Engineering Journal, 2019, 376:120431(1-10). DOI:10.1016/j. cej. 2018. 11. 129.
- [31] ZHU Ling, HUAN Cheng, HAN Wenhui, *et al*. Structure-dependent Fenton reactivity and degradation pathway of methylimidazolium ionic liquids[J]. ACS E&T Water, 2020, 1(4):808-814. DOI:10.1021/acsestwater. 0c00162.
- [32] LIU W J,KWON E, THANH B X, et al. Hofmann-MOF derived nanoball assembled by FeNi alloy confined in carbon nanotubes as a magnetic catalyst for activating peroxydisulfate to degrade an ionic liquid[J]. Separation and Purification Technology, 2021, 295:120945.
- [33] JIANG X Y, EILHANN K, WEN J C. Direct growth of nano-worm-like Cu₂S on copper mesh as a hierarchical 3D

catalyst for Fenton-like degradation of an imidazolium room-temperature ionic liquid in water[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2023, 638:39-53. DOI:10.1016/j.jcis. 2023.01.029.

- [34] SÄRKKÄ H, BHATNAGAR A, SILLANPÄ M. Recent developments of electro-oxidationin water treatment: A review[J]. Journal of Electroanalytical Chemistry, 2015, 754: 46-56. DOI: 10.1016/j. jelechem. 2015. 06. 016.
- [35] GANZENKO O, HUGUENOT D, VAN HULLEBUSCH E D, et al. Electrochemical advanced oxidation and biological processes for wastewater treatment: A review of the combined approaches[J]. Environmental Science and Pollution Research International, 2014, 21(14):8493-8524. DOI:10.1007/S11356-014-2770-6.
- [36] CRUZ-GONZÁLEZ K, TORRES-LOPEZ O, GARCÍA-LEÓN A M, et al. Optimization of electro-Fenton/BDD process for decolorization of a model azo dye wastewater by means of response surface methodology[J]. Desalination, 2012, 286:63-68. DOI:10.1016/j. desal. 2011.11.005.
- [37] MARTÍNEZ-PACHÓN D, IBÁÑEZ M, HERNÁNDEZ F, et al. Photo-electro-Fenton process applied to the degradation of valsartan: Effect of parameters, identification of degradation routes and mineralization in combination with a biological system[J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2018, 6(6):7302-7311. DOI:10.1016/ j. jece. 2018. 11. 015.
- [38] ANGLADA A, URTIAGA A, ORTIZ I. Contributions of electrochemical oxidation to waste-water treatment: Fundamentals and review of applications[J]. Journal of Chemical Technology & Biotechnology, 2009, 84(12):1747-1755. DOI:10.1002/jctb.2214.
- [39] BRILLAS E, MARTINEZ-HUITLE C A. Decontamination of wastewaters containing synthetic organic dyes by electrochemical methods: An updated review[J]. Applied Catalysis B: Environmental, 2015, 166/167: 603-643. DOI:10.1016/j.apcatb.2014.11.016.
- [40] SIEDLECKA E M,STOLTE S,GOTEBIOWSKI M,et al. Advanced oxidation process for the removal of ionic liquids from water: The influence of functionalized side chains on the electrochemical degradability of imidazolium cations[J]. Separation and Purification Technology,2012,101:26-33. DOI:10.1016/j. seppur. 2012. 09. 012.
- [41] MENA I F, COTILLAS S, DÍAZ E, *et al*. Influence of the supporting electrolyte on the removal of ionic liquids by electrolysis with diamond anodes[J]. Catalysis Today, 2018, 313:203-210. DOI:10.1016/j. cattod. 2017. 10.025.
- [42] PIECZYNSKA A,OFIARSKA A,BORZYSZKOWSKA A F,et al. A comparative study of electrochemical degradation of imidazolium and pyridinium ionic liquids: A reaction pathway and ecotoxicity evaluation[J]. Separation and Purification Technology, 2015, 156:522-534. DOI: 10.1016/j. seppur. 2012. 09.012.
- [43] FABIANSKA A,OSSOWSKI T,STEPNOWSKI P,et al. Electrochemical oxidation of imidazolium-based ionic liquids: The influence of anions[J]. Chemical Engineering Journal and Journal, 2012, 198-199; 338-345. DOI: 10. 1016/j. cej. 2012. 05. 108.
- [44] MENA I F, COTILLAS S, DÍAZ E, et al. Sono- and photoelectrocatalytic processes for the removal of ionic liquids based on the butyl-3-methylimidazolium cation[J]. Journal of Hazardous Materials, 2019, 372: 77-84. DOI: 10. 1016/j. jhazmat. 2017. 12. 015.
- [45] SIEDLECKA E M,FABIANSKA A,STOLTE S, et al. Electrocatalytic oxidation of 1-butyl-3-methylimidazolium chloride: Effect of the electrode material[J]. International Journal of Electrochemical Science, 2013, 8:5560-5574. DOI:10.1166/sl.2013.2512.
- [46] BOUYA H, ERRAMI M, SALGHI R, *et al*. Comparison of pyridazinium electro-oxidation on boron-doped diamond (BDD) and SnO₂ in a basic medium[J]. Port Electrochim Acta, 2015, 33(1):13-21. DOI:10.4152/pea.201501013.
- [47] MENA I F, COTILLAS S, DÍAZ E, et al. Electrolysis with diamond anodes: Eventually, there are refractory species! [J]. Chemosphere, 2018, 195:771-776. DOI:10.1016/j. chemosphere. 2017. 12. 120.
- [48] GARCIA-SEGURA S,LIMA A S,CAVALCANTI E B, et al. Anodic oxidation, electro-Fenton and photoelectro-Fenton degradations of pyridinium- and imidazolium-based ionic liquids in waters using a BDD/air-diffusion cell
 [J]. Electrochimica Acta, 2016, 198:268-279. DOI:10.1016/j. electacta. 2016. 03. 057.
- [49] PEZIAK-KOWALSKA D, FOURCADE F, NIEMCZAK M, et al. Removal of herbicidal ionic liquids by electrochemical advanced oxidation processes combined with biological treatment[J]. Environmental Technology, 2017, 38
 (9):1093-1099. DOI:10.1080/09593330.2016.1217941.
- [50] BOCOS E, GONZALEZ-ROMERO E, PAZOS M, et al. Application of electro-Fenton treatment for the elimination of 1-butyl-3-methylimidazolium triflate from polluted water[J]. Chemical Engineering Journal and Journal, 2017,

318:19-28. DOI:10.1016/j.cej.2016.04.058.

- [51] ARELLANO M,OTURAN N,PAZOS M, et al. Coupling electro-Fenton process to a biological treatment, a new methodology for the removal of ionic liquids? [J]. Separation and Purification Technology, 2020, 233:116050(1-10). DOI:10.1016/j. seppur. 2019.115990.
- [52] ARELLANO M, SANROMAN M A, PAZOS M. Electro-assisted activation of peroxymonosulfate by iron-based minerals for the degradation of 1-butyl-1-methylpyrrolidinium chloride[J]. Separation and Purification Technology, 2019,208:34-41. DOI:10.1016/j. seppur. 2018.05.028.
- [53] BOCOS E, PAZOS M, SANROMAN M A. Electro-Fenton treatment of imidazolium- based ionic liquids: Kinetics and degradation pathways[J]. RSC Advances, 2016, 6(3):1958-1965. DOI:10.1039/c5ra24070k.
- [54] POZA-NOGUEIRAS V, ARELLANO M, ROSALES E, et al. Heterogeneous electro-Fenton as plausible technology for the degradation of imidazolinium-based ionic liquids [J]. Chemosphere, 2018, 199: 68-75. DOI: 10. 1016/j. chemosphere. 2018. 01. 174.
- [55] DÍEZ A M, PAZOS M, SANROMÁN M A. Bifunctional floating catalyst for enhancing the synergistic effect of LED photolysis and electro-Fenton process[J]. Separation and Purification Technology, 2020, 230: 115880. DOI: 10.1016/j. seppur. 2019. 115880.
- [56] MIKLOS D B, HARTL R, MICHEL P, et al. UV/H₂O₂ process stability and pilot-scale validation for trace organic chemical removal from wastewater treatment plant effluents [J]. Water Research, 2018, 136:169-179. DOI: 10. 1016/j. watres. 2018. 02. 044.
- [57] XIE Pengchao, MA Jun, LIU Wei, et al. Removal of 2-MIB and geosmin using UV/persulfate: Contributions of hydroxyl and sulfate radicals[J]. Water Research, 2015, 69(1):223-233. DOI:10.1016/j. watres. 2014. 11.029.
- [58] AN S N, CHOI N C, CHOI J W, et al. Photodegradation of bisphenol A with ZnO and TiO₂: Influence of metal ions and Fenton process[J]. Water Air & Soil Pollution, 2018, 229(2): 43(1-11). DOI: 10.1007/s11270-018-3701-9.
- [59] SOOD S,UMAR A,MEHTA S K, et al. Highly effective Fe-doped TiO₂ nanoparticles photocatalysts for visiblelight driven photocatalytic degradation of toxic organic compounds[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2015,450:213-223. DOI:10.1016/j.jcis.2015.03.018.
- [60] REY A,GARCÍA-MUÑOZ P, HERNÁNDEZ-ALONSO M D, et al. WO₃-TiO₂ based catalysts for the simulated solar radiation assisted photocatalytic ozonation of emerging contaminants in a municipal wastewater treatment plant effluent[J]. Applied Catalysis B: Environmental, 2014, 154/155: 274-284. DOI: 10. 1016/j. apcatb. 2014. 02. 035.
- [61] STEPNOWSKI P,ZALESKA A. Comparison of different advanced oxidation processes for the degradation of room temperature ionic liquids[J]. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry,2005,170(1),45-50. DOI: 10.1016/j.jphotochem. 2004. 07. 019.
- [62] BANIC N, ABRAMOVIC B, ŠIBUL F, et al. Advanced oxidation processes for the removal of [bmim][Sal] third generation ionic liquids: Effect of water matrices and intermediates identification[J]. RSC Advances, 2016, 6(58): 52826-52837. DOI:10.1039/c6ra04416f.
- [63] CALZA P, FABBRI D, NOÈ G, et al. Assessment of the photocatalytic transformation of pyridinium-based ionic liquids in water[J]. Journal of Hazardous Materials, 2018, 341:55-65. DOI:10.1016/j. jhazmat. 2017.07.037.
- [64] da SILVE W L,LEAL B C,ZIULKOSKI A L, et al. Petrochemical residue-derived silica-supported titania-magnesium catalysts for the photocatalytic degradation of imidazolium ionic liquids in water[J]. Separation and Purification Technology, 2019, 218:191-199. DOI:10.1016/j. seppur. 2019. 01.066.
- [65] MORAWSKI A W, JANUS M, GOC-MACIEJEWSKA I, et al. Decomposition of ionic liquids by photocatalysis
 [J]. Polish Journal of Chemistry, 2005, 79: 1929-1935. DOI:10.1016/j. apcatb. 2014. 02. 035.
- [66] PATI S G, ARNOLD W A. Reaction rates and product formation during advanced oxidation of ionic liquid cations by UV/peroxide, UV/persulfate, and UV/chlorine[J]. Environmental Science: Water Research & Technology, 2018,4(9):1310-1320. DOI:10.1039/c8ew00254a.
- [67] PATI S G, ARNOLD W A. Photochemical transformation of four ionic liquid cation structures in aqueous solution
 [J]. Environmental Science & Technology, 2017, 51(20):11780-11787. DOI:10.1021/acs. est. 7b04016.
- [68] GOMEZ-HERRERO E, TOBAJAS M, RODRIGUEZ J J, et al. Ionic liquids removal by sequential photocatalytic

and biological oxidation[J]. Journal of Chemical Technology & Biotechnology, 2020, 95(7): 1926-1935. DOI: 10. 1002/jctb. 6306.

- [69] SPASIANO D, SICILIANO A, RACE M, et al. Biodegradation, ecotoxicity and UV254/H₂O₂ treatment of imidazole, 1-methylimidazole and N, N'-alkyl-imidazolium chlorides in water[J]. Water Research, 2016, 106(1):450-460. DOI:10.1016/j. watres. 2016. 10.026.
- [70] BEDIA J, RODRIGUEZ J J, MORENO D, *et al*. Photostability and photocatalytic degradation of ionic liquids in water under solar light[J]. RSC Advances, 2019, 9(4): 2026-2033. DOI: 10.1039/c8ra07867j.
- [71] AHMAD T, BUSTAM M A, IRFAN M, et al. Effect of gold and iron nanoparticles on photocatalytic behaviour of titanium dioxide towards 1-butyl-3-methylimidazolium chloride ionic liquid[J]. Journal of Molecular Liquids, 2019, 291:111277(1-5). DOI:10.1016/j. molliq. 2019.111277.
- [72] KAABECHE O N E H,ZOUAGHI R,BOUKHEDOUA S, et al. A comparative study on photocatalytic degradation of pyridinium-based ionic liquid by TiO₂ and ZnO in aqueous solution[J]. International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2019, 17(9): 20180253(1-14). DOI:10.1515/ijcre-2018-0253.
- [73] RAUTA S S,KULKARNI P S. Photodegradation of an ammonium ionic liquid: Spiking in urban wastewater and comparison with aromatic ionic liquids[J]. Environmental Science: Water Research & Technology, 2021, 7(10): 1723-1736. DOI:10.1039/d1ew00245g.
- [74] ZHANG LI,LU Weiwei,XU PENG, et al. Plasmon-mediated activation of persulfate for efficient photodegradation of ionic liquids over Ag@Pd core-shell nanocubes[J]. Applied Catalysis B: Environmental, 2022, 301:120751(1-11). DOI:10.1016/j.apcatb.2021.120751.
- [75] GUO Ruixue, QI Yumeng, LI Beibei, et al. Efficient degradation of alkyl imidazole ionic liquids in simulated sunlight irradiated periodate system: Kinetics, reaction mechanisms, and toxicity evolution[J]. Water Research, 2022, 226:119316. DOI: 10.1016/j. watres. 2022. 119316.
- [76] WANG X R, YU M X, JIA Q Z, et al. The degradation of 1-ethyl-3-methylimidazolium chloride ionic liquids by simulated and natural sunlight activated persulfate: Degradation kinetics, mechanisms and pathways[J]. Journal of Water Process Engineering, 2023, 53:103895.
- [77] AMEUR B,RAZIKA Z,SYLVIE G,et al. Effects of sodium persulfate and hydrogen peroxide on imidazolium ionic liquid degradation by simulated solar light in aqueous ZnO suspension[J]. International Journal of Chemical Kinetics,2023,55(6):291-299. DOI:10.1002/kin.21636.
- [78] 刘娇琴,曲瑞娟,王遵尧,等. UV/Na₂CO₅ 降解水中咪唑类离子液体影响因素的研究[J]. 水处理技术,2023,49 (7):90-95. DOI:10.16796/j. cnki. 1000-3770. 2023. 07. 016.
- [79] DMITRI N,SERGEI P,NIINA D. Degradation of imidazolium-based ionic liquids by UV photolysis and pulsed corona discharge: The effect of persulfates addition[J]. Separation and Purification Technology, 2024, 344:127235. DOI:10.1016/j. seppur. 2024. 127235.

(责任编辑:黄仲一 英文审校:刘源岗)

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202401016

采用 Cell-SELEX 技术的核酸适配体 在肿瘤靶向治疗的研究进展



成志云,陈佳怡,白如玉,杨会勇, MOHSAN Ullah, 刁勇

(华侨大学 医学院, 福建 泉州 362021)

摘要: 阐述细胞-配体指数富集系统进化(Cell-SELEX)技术特点,以及通过该技术筛选得到的核酸适配体在 肿瘤靶向治疗中的应用进展和挑战,通过查阅近年的相关文献,综述核酸适配体作为药物及药物载体在肿瘤 靶向治疗中的应用研究进展。结果表明:基于 Cell-SELEX 技术筛选得到的核酸适配体在肿瘤靶向治疗中的 疗效显著,可开发成为肿瘤靶向治疗的潜力药物及良好的药物载体。

关键词: 核酸适配体;细胞-配体指数富集系统进化(Cell-SELEX)技术;肿瘤;靶向治疗 中图分类号: R 944 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2024)04-0439-06

Research Progress of Aptamers Using Cell-SELEX Technology in Cancer Targeted Treatment

CHENG Zhiyun, CHEN Jiayi, BAI Ruyu, YANG Huiyong, MOHSAN Ullah, DIAO Yong

(School of Medicine, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China)

Abstract: The characteristics of cell-systematic evolution of ligands by exponential enrichment (Cell-SELEX) technology as well as the application progress and challenges of screened aptamers in cancer-targeted treatment through this technology were expounded. And the research progress about cancer-targeted treatment applications of aptamers as drugs or drug carriers were reviewed by consulting relevant literature in recent years. The results show that the aptamers screened based on Cell-SELEX technology have significant therapeutic effects and can be developed as potential drugs and good drug carriers in cancer-targeted treatment.

Keywords: aptamers; cell-systematic evolution of ligands by exponential enrichment (Cell-SELEX) technology; cancer; targeted treatment

核酸适配体又称适配子、适体、化学抗体,是通过配体指数富集系统进化(SELEX)技术筛选获得的 能与靶分子专一、高效结合的单链脱氧核糖核酸(ssDNA)或核糖核酸(RNA),一般由 20~80 个碱基构 成。与传统蛋白抗体相比,核酸适配体具有制备方便、稳定性好、靶标广泛、无免疫原性、易渗透入组织 内部等多项独特优势。

20 多年来,核酸适配体在多个领域得到了普遍关注和广泛应用,大量疾病相关分子的核酸适配体 被筛选出来,并被应用于疾病诊断及药物研发。第1个核酸适配体药物 Pegaptanib(商品名为Macugen) 已于2004年通过美国食品药品监督管理局(FDA)批准上市^[1],它是针对血管内皮细胞生长因子

收稿日期: 2024-01-29

通信作者: 刁勇(1967-),男,教授,博士,博士生导师,主要从事基因药物的研究。E-mail:diaoyong@hqu.edu.cn。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(20141ZA003);福建省泉州市高层次人才创新项目(20221ZC061)

(VEGF)设计,用于治疗老年性黄斑变性,成为核酸适配体研究领域的一个里程碑。由于癌变细胞基因 突变,其表面分子类型及表达水平发生变化,故筛选得到的核酸适配体具有高度的肿瘤细胞特异性,从 而在肿瘤的早期诊断和靶向治疗中显示出巨大的潜能和优越性。

肿瘤相关蛋白如蛋白酪氨酸磷酸酶受体、血小板源性生长因子(PDGFR)、蛋白酪氨酸激酶 7 (PTK7)、核转录因子 kB、VEGF、整合素 α4、高密度脂蛋白结合蛋白、应激诱导磷蛋白 1、c-Kit 蛋白、唾液酸结合免疫球蛋白样凝集素 5、组织蛋白酶 D、酪氨酸蛋白激酶蛋白 117(CD117)、转铁蛋白受体 CD71(CD71)、白细胞分化抗原 109(CD109)等的核酸适配体已被筛选出并应用于肿瘤诊断及治疗 中^[2-7],这些核酸适配体大部分是通过细胞-配体指数富集系统进化(Cell-SELEX)技术筛选得到,得到的 核酸适配体可直接用于肿瘤的靶向治疗,也可作为肿瘤治疗药物的载体。

基于此,本文对采用 Cell-SELEX 技术的核酸适配体在肿瘤靶向治疗的研究进展进行综述。

1 Cell-SELEX 技术及其特点

Cell-SELEX 是一种将整个活细胞作为靶标筛选核酸适配体的技术。目前,常用肿瘤细胞作为正筛 靶标,相应正常细胞作为反筛靶标,从而得到肿瘤细胞特异性核酸适配体。

1.1 筛选的基本步骤

核酸适配体的筛选有以下5个步骤。

步骤1 将 ssDNA 随机文库与肿瘤细胞孵育,进行正向筛选。

步骤 2 洗涤细胞,去除未结合的 ssDNA,然后高温加热,离心得到与靶细胞结合的 ssDNA。

步骤3 将得到的 ssDNA 与对应正常细胞孵育,进行反向筛选,去除与肿瘤细胞非特异性结合的 ssDNA。

步骤4 将步骤3未结合的 ssDNA 作为模板, 进行大规模不对称聚合酶链式反应(PCR)扩增,分 离单链,得到次级文库,用于下一轮筛选。

步骤5 步骤1~4循环,一般经过15~20轮正 向与反向筛选,即可得到与肿瘤细胞特异性结合的 ssDNA,即特异性核酸适配体(图1)。然后,克隆、测 序,对筛选得到的核酸适配体进行亲和力等特性检 测并验证。



图 1 Cell-SELEX 技术过程 Fig. 1 Cell-SELEX technology process

1.2 Cell-SELEX 技术特点

相较于 SELEX 技术筛选得到的核酸适配体,以整个活细胞为靶标筛选得到的核酸适配体具有多种独特优势,Cell-SELEX 技术不需了解靶分子的种类、数量、分布及构象,使工作量减少;Cell-SELEX 技术以整个活细胞为靶标,可实现多靶点的筛选。肿瘤 Cell-SELEX 技术的核心是利用任意两种完整活细胞膜表面所有分子水平之间的差异(不是单个或几个纯化的靶分子) 来筛选能特异性识别靶细胞的核酸适配体,从而准确地区分正常细胞和肿瘤细胞^[8]。

Calzada 等^[9]通过对急性 T 淋巴细胞白血病前体细胞 CCRF-CEM 的筛选,得到核酸适配体 sgc8, 通过质谱分析证实其靶蛋白为 PTK7,与正常骨髓细胞相比,PTK7 在 CCRF-CEM 上特异性高表达,在 白血病发展过程中起重要作用,利用 AlexaFluor647 和 6-hydrazinonicotinamide 两种荧光染料标记该 适配体,在荷瘤小鼠中成功对黑色素瘤和淋巴瘤细胞进行标记,表明 Cell-SELEX 技术用于筛选肿瘤细 胞特异性核酸适配可行、可靠。

Dharmasiri 等^[10]用前列腺特异性膜抗原适配体捕获前列腺癌细胞,得到高达 96%的捕获率。同时,Xu 等^[11]利用固定的核酸适配体在"S"形微流体装置中富集多种血浆中低浓度的肿瘤细胞,细胞纯度可达 96%。这些研究显示肿瘤细胞特异性核酸适配体具有高亲和力、靶向性和区分细胞的能力,为此技术用于肿瘤靶向、精准治疗提供了依据。

2 经 Cell-SELEX 技术筛选的核酸适配体在肿瘤治疗中的应用

在肿瘤治疗中,特异性靶向药物具有治疗效果显著、毒副作用低的优点,采用 Cell-SELEX 技术筛 选得到的核酸适配体具有高度的肿瘤特异性,在肿瘤靶向治疗方面有巨大的潜能。

2.1 Cell-SELEX 技术筛选核酸适配体直接作为靶向药物

与抗体药物相比,核酸适配体药物因具有高稳定性、耐高温、低免疫原性、低成本、短周期等优点而 备受关注,针对肿瘤细胞和正常细胞表达差异的 VEGF、核仁素、细胞粘合素 C 等蛋白的核酸适配体药 物已陆续筛选出来^[12]。然而,Cell-SELEX 技术开发和应用之后,更多更具意义的肿瘤标志物被鉴定出 来,相应的核酸适配体药物也随之开发。Rong 等^[13]以具有转移潜能的肝癌细胞 MHCC97L 作为模型, 以具有高转移潜能的肝癌细胞 HCCLM9 为对象,采用 Cell-SELEX 技术进行筛选,得到特异性适配体 LY-1。LY-1可直接作用于 HCCLM9,体外实验表明 HCCLM9 迁移和侵袭性能降低,而体内实验表明 HCCLM9 抑制了肿瘤的生长。核酸适配体还可作为信号分子影响细胞生长、凋亡相关信号通路。Cerchia 等[14]采用 Cell-SELEX 技术筛选得到了分泌腺肿瘤的核酸适配体,其靶标为人受体酪氨酸激酶 RET, 识别 RET 胞外结构域, 不但能抑制 RET 的激活, 还能有效抑制 RET 介导的信号通路, 影响细胞 生长和分化,起到治疗作用,又将恶性人神经胶质瘤细胞系 U87MG 作为正向筛选细胞,将致瘤性差的 神经胶质瘤细胞系 T98G 作为反向筛选细胞,得到 U87MG 的特异核酸适配体,其可通过抑制细胞增殖 中关键分子 ERK1/2 和 cyclin D1 的活性,影响胞内信号转导从而抑制肿瘤细胞增殖。上述研究为以膜 受体为靶点进行肿瘤治疗提供了方法。Zueva 等^[15]根据恶性仓鼠细胞细胞系 HET-SR-1(HM)和 HET-SR(LM)致瘤性和生长性相同,但前者体内更容易转移的特性,采用 Cell-SELEX 技术将 HM 作 为正向筛选靶标,LM 作为反向筛选靶标,得到两个特异性结合高侵袭细胞系 HM 的核酸适配体 E10 和 E37。实验表明,E10 主要作用于细胞膜,而 E37 作用于细胞内,两者通过改变酪氨酸激酶的磷酸化 抑制肿瘤细胞的迁移,抑制率高达 85%,仅 E10 对肿瘤细胞也有高达 75%的侵袭抑制率。E37 虽不具 有抑制迁移的作用,但其可被细胞摄取的特性能用于胞内成像和药物传递。同时,研究人员发现 E10 和 E37 无论是对人乳腺癌细胞系 MDA-MB231,还是小鼠永生成纤维细胞系 NIH3T3 都没有结合作 用,表明不同种属或同种属不同器官的肿瘤细胞具有不同的转移相关分子,进一步说明了采用 Cell-SELEX 技术可筛选出针对特定肿瘤细胞的高特异性核酸适配,靶向性精确,不会对其他细胞造成损伤。 核酸适配体和传统化疗药物联合使用,可达到协同增效的目的,如以非小细胞肺癌细胞 A549 为靶标, 通过 Cell-SELEX 技术获得能以高亲和力结合表皮生长因子受体(EGFR)的核酸适配体 CL4,它可通过 抑制 EGFR 活性及其介导的信号通路诱导 EGFR 阳性肿瘤细胞的凋亡,但对 EGFR 阴性细胞没有作 用。A549 细胞对 EGFR 常用抑制剂吉非替尼和西妥昔单抗显示耐药性,体外和小鼠体内移植瘤实验 证明,联合使用 CL4 和西妥昔单抗在诱导细胞凋亡方面有协同作用^[16]。Mahlknecht 等^[17]筛选得到 N87 胃癌细胞异常分子 ErbB-2/HER2 的核酸适配体 2-2(t),实验表明,其在体外具有抑制癌细胞生 长,体内有降低人胃癌移植瘤生长率的作用,抑瘤效果为 ErbB-2/HER2 单克隆抗体的两倍。以埃利希 氏腹水癌细胞为阳性细胞,采用 Cell-SELEX 技术经过 10 轮筛选,得到核酸适配体 AS-14 和 AS-9,体 外细胞实验表明,AS-14 对腺癌细胞具有诱导凋亡的作用,AS-9 具有抑制增殖的作用,AS-14 对应的靶 标为肿瘤发展和细胞增殖过程中的关键分子 filamin A,AS-9 的靶标为线粒体 ATP 合成酶 α 亚基,为 线粒体氧化磷酸化的重要组成部分^[18]。Camorani等^[19]采用 Cell-SELEX 技术,以恶性胶质瘤细胞为 靶标,经过14轮筛选得到可特异性结合于 PDGFRβ 胞外结构域的核酸适配体 Gint4. T,其可抑制人胶 质瘤细胞上 PDGFR 的激活及下游信号的传递,在体内 Gint4.T 通过抑制肿瘤细胞增殖和迁移,抑制肿 瘤的生长。联合应用适配体 Gint4. T 与 CL4 抑肿瘤效果增强,说明靶点不同的核酸适配体可联合使 用,多靶点抑制肿瘤生长。

通过以上研究可知,针对肿瘤细胞的 Cell-SELEX 技术筛选核酸适配体切实可行,且筛选得到的适 配体对肿瘤靶的向性高,抑制作用显著。适配体通过对肿瘤细胞表面失调分子的抑制,进一步调控下游 信号通路来影响肿瘤细胞的增殖、迁移、侵袭等活动,以实现抗肿瘤作用。此外,核酸适配体之间或和其 他药物联合用药,可发挥协同作用,抑瘤效果增强。

2.2 Cell-SELEX 技术筛选核酸适配体作为药物靶向载体

采用 Cell-SELEX 技术筛选得到特异识别肿瘤细胞的核酸适配体,将其与抗肿瘤单克隆抗体、siR-NA、脂质体、胶束、纳米粒和纳米管等具有抗肿瘤作用的药物通过物理结合或化学键合,定点导向于肿瘤细胞,药物特异性地在肿瘤细胞周围或细胞内富集,药物浓度增加,停留时间延长,可提高治疗效力。 2.2.1 核酸适配体偶联药物 核酸适配体和药物偶联的方式有化学的共价结合和物理的分子间相互作用力结合两种方式,将药物靶向递送到肿瘤细胞。Esposito 等^[20]采用 Cell-SELEX 技术筛选得到可特异性结合 CD19 蛋白的核酸适配体 B85. T2,其对纯化的人重组 CD19 糖蛋白的解离常数为(49.9±13.0) nmol•L⁻¹,可特异性结合表达 CD19 的慢性淋巴细胞白血病细胞,且能够内化进入 CD19 阳性细胞,和 miRNA 互补杂交非共价偶联后处理肿瘤细胞,显著抑制细胞增殖,诱导细胞凋亡,说明适配体靶向性运载药物到肿瘤细胞是可行的。Meraviglia-Crivelli 等^[21]构建 AS1411 和 RNAi 缀合物AS1411-SMG1 AsiCs,无论是局部给药还是系统给药,结合体都可显著抑制肿瘤生长,且无毒副作用。

适配体与蛋白偶联是通过适配体的核苷酸与蛋白质中氨基酸侧链的氢键、盐桥、范德华力等非共价 键相互作用。植物毒素 Gelonin 可通过破坏 rRNA 的糖苷键,阻断蛋白质的合成,有效杀死肿瘤细胞, 但其缺少移位结构域,不易入胞达到有效的杀伤浓度。Kelly 等^[22]将 Gelonin 蛋白与核酸适配体 A9 偶 联,不但克服了 Gelonin 不易入胞的缺点,其对前列腺癌细胞的杀伤力是单用 Gelonin 的 180 倍,还减少 了其对正常细胞的毒性,适配体扮演了"护卫"的角色。

Qiao 等^[23]以紫杉醇耐药的食管鳞状细胞癌(ESCC)细胞系为靶标,采用 Cell-SELEX 技术筛选靶 向阻抑素-2 的核酸适配体 SYL-6。阿霉素(Dox)能够嵌入 DNA 的-GC-富集区域阻断 DNA 复制导致 细胞死亡,是常用肿瘤化疗药物,将 Dox 插入 SYL-6中,通过非共价结合形成 SYL-6-Dox 偶联药物,体 内实验证明,SYL-6-Dox 组可显著抑制肿瘤生长,且副作用较 Dox 单独用药组更低,说明核酸适配体 SYL-6 可作用化疗药物的有效载体。研究人员采用 Cell-SELEX 技术筛选得到靶向蛋白酪氨酸激酶 7 (PTK7)的核酸适配体 sgc8c,sgc8c 通过 PH 敏感的腙键共价连接 Dox,形成 sgc8c-Dox 络合物,在肿瘤 组织的酸性微环境中,腙键断裂,靶向释放药物到目标组织^[24]。

2.2.2 核酸适配体-生物材料结合 将包裹紫杉醇的聚乙二醇纳米粒子与适配体 Apt(S1.5)连接形成 复合物 Apt(S1.5)-PTX-NP,Apt(S1.5)靶向乳腺癌中高度表达的乙酰肝素酶。相较于非靶向的 PTX-NP,复合物具有更强的抗侵袭和抗血管生成能力,是一种有前途的三阴性乳腺癌治疗的靶向药物^[25]。

脂质体是一种将药物包装于脂质或类脂质双分子层内形成的微型囊泡,AS1411 适配体可以特异性地与癌细胞表面过表达的核仁蛋白结合,研究人员将 AS1411 核酸适配体偶联脂质体靶向结直肠癌 细胞,递送 siRNA 干扰 COL1A1 基因表达,提高了肿瘤细胞对化疗药物的敏感性^[26]。研究还发现核酸 适配体可以增强肿瘤细胞对药物的敏感性,AS1411 与金纳米粒子连接,S1411 适配体增强了金纳米颗 粒向癌细胞的传递,并增强了辐射诱导的癌细胞死亡^[27],为适配体的又一临床应用提供了依据。Wang 等^[28]利用红细胞膜制备囊泡包裹 siRNA 和阿霉素,用于治疗多药耐药的肿瘤。修饰在囊泡上的适配 体赋予了囊泡肿瘤靶向能力,通过 P-gp 沉默和 Dox 诱导的生长抑制作用,成功克服耐药问题,协同杀 伤肿瘤细胞。这种靶向思路为肿瘤耐药提供了一种克服策略。

适配体不仅可做载体,特异性核酸适配体还能募集免疫细胞调动自身免疫系统对肿瘤细胞进行杀伤,Boltz等^[29]采用 Cell-SELEX 技术,以 CD16 阳性的 Jurkat 细胞为正向筛选细胞,得到的核酸适配体成功将 NK 细胞募集靶向定位于人肺癌细胞 EBC-1、人胃癌细胞 GTL-16 和 MKN-45,说明采用 Cell-SELEX 技术筛选高特异性核酸适配体不仅可作为肿瘤靶向治疗药物或药物运载体,还可以募集免疫细胞趋于癌变细胞,为肿瘤的免疫治疗提供了新的策略。

3 总结与展望

核酸适配体由于高特异性、亲和性、易体外合成等优点,广泛应用于蛋白检测、生物传感器和药物筛选中,而采用 Cell-SELEX 技术可筛选靶向肿瘤细胞表面未知蛋白的核酸适配体,进而用于肿瘤细胞的富集、检测、成像及肿瘤治疗^[30]。采用 Cell-SELEX 技术筛选适配体用于肿瘤的靶向治疗日益受到关注,并已在体内和体外研究中显示出对肿瘤细胞的高靶向作用。采用 Cell-SELEX 技术,实验室可以筛

选高亲和力和特异性的靶向剂,使之成为一种有前途的研究工具,也是应用适配体到个体化诊断和医学 应用的第一步。

在多年的研究中,研究人员已经克服了适配体应用中的多个缺点,但在肿瘤靶向治疗这一领域,核酸适配体仍然面临多方面的挑战。

首先,在技术层面,Cell-SELEX 技术以活细胞为靶标,筛选过程受细胞生长温度改变、死细胞、细胞 表面分子结构改变等因素的影响,导致假阳性甚至筛选失败,研究人员虽通过技术避免这个问题,但其 仍是 Cell-SELEX 技术的困扰。

其次,核酸适配体作为靶向药物而言,对细胞功能性方面的研究较少,核酸适配体作为靶向递送载 体而言,与药物偶联方式及其递释系统的有效性有待进一步考察。

最后,作为治疗药物的核酸适配体较少进入临床试验阶段,更少应用于临床,其在体内的稳定性、可能的副作用、体内清除率都还未研究清楚,这使临床应用受到了限制,核酸适配体的稳定性、非特异性结合及安全性等问题仍需进一步研究考察^[31]。

采用 Cell-SELEX 技术筛选得到的细胞特异性适配体在治疗人类疾病方面展现了巨大的潜力和优势,但也面临诸多挑战,相信随着研究的深入,Cell-SELEX 筛选技术的不断完善,这些问题将会一一解决,从而使 Cell-SELEX 技术筛选核酸适配体技术在肿瘤的靶向治疗方面发挥更大的作用。

参考文献:

- [1] NG E W M, SHIMA D T, CALIAS P, et al. Pegaptanib, a targeted anti-VEGF aptamer for ocular vascular disease
 [J]. Nature Reviews Drug Discovery, 2006, 5(2):123-132. DOI:10.1038/nrd1955.
- [2] BING Tao, SHANGGUAN Dihua, WANG Yinsheng. Facile discovery of cell-surface protein targets of cancer cell aptamers[J]. Molecular and Cellular Proteomics, 2015, 14(10): 2692-2700. DOI: 10.1074/mcp. m115.051243.
- [3] ZHOU Wei, ZHAO Libo, YUAN Hongyu, et al. A new small cell lung cancer biomarker identified by Cell-SELEX generated aptamers[J]. Experimental Cell Research, 2019, 382(2/3):111478. DOI:10.1016/j. yexcr. 2019.06.023.
- [4] LYU Jing, ZHEN Xiaoxiao, LI Dandan, et al. Generation of an aptamer targeting receptor-type tyrosine protein phosphatase F[J]. Analytical Chemistry, 2023, 95(2):1228-1233. DOI:10.1021/acs. analchem. 2c03988.
- [5] ZAMAY G S,KOLOVSKAYA O S,ZAMAY T N, et al. Aptamers selected to postoperative lung adenocarcinoma detect circulating tumor cells in human blood[J]. Molecular Therapy, 2015, 23(9): 1486-1496. DOI: 10. 1038/mt. 2015. 108.
- [6] WU Xiaoqiu, LIU Honglin, HAN Dongmei, et al. Elucidation and structural modeling of CD71 as a molecular target for cell-specific aptamer binding[J]. Journal of the American Chemical Society, 2019, 141(27): 10760-10769. DOI: 10.1021/jacs. 9b03720.
- [7] JIA Wenting, REN Caiping, WAN Lei, et al. CD109 is identified as a potential nasopharyngeal carcinoma biomarker using aptamer selected by cell-SELEX[J]. Oncotarget, 2016, 7(34):55328-55342. DOI:10.18632/oncotarget.10530.
- [8] WANG Guodong, LIU Jun, CHEN Ke, et al. Selection and characterization of DNA aptamer against glucagon receptor by cell-SELEX[J]. Scientific Reports, 2017, 7(1):7179. DOI:10.1038/s41598-017-05840-w.
- [9] CALZADA V, MORENO M, NEWTON J, et al. Development of new PTK7-targeting aptamer-fluorescent and radiolabelled probes for evaluation as molecular imaging agents: Lymphoma and melanoma in vivo proof of concept[J]. Bioorganic and Medicinal Chemistry, 2017, 25(3):1163-1171. DOI:10.1016/j. bmc. 2016.12.026.
- [10] DHARMASIRI U, BALAMURUGAN S, ADAMS A A, et al. Highly efficient capture and enumeration of low abundance prostate cancer cells using prostate-specific membrane antigen aptamers immobilized to a polymeric microfluidic device[J]. Electrophoresis, 2009, 30(18): 3289-3300. DOI:10.1002/elps. 200900141.
- [11] XU Ye, PHILLIPS J A, YAN Jilin, *et al*. Aptamer-based microfluidic device for enrichment, sorting, and detection of multiple cancer cells[J]. Analytical Chemisitry, 2009, 81(17):7436-7442. DOI:10.1021/ac9012072.
- [12] 刁勇,王立强,邱飞.抗肿瘤适体药物的研究进展[J].中国生化药物杂志,2009,30(6):415-418.
- [13] RONG Yuan, CHEN Hao, ZHOU Xuefeng, et al. Identification of an aptamer through whole cell-SELEX for targeting high metastatic liver cancers[J]. Oncotarget, 2016,7(7):8282-8294. DOI:10.18632/oncotarget.6988.
- [14] CERCHIA L, DUCONGÉ F, PESTOURIE C, et al. Neutralizing aptamers from whole-cell SELEX inhibit the RET receptor tyrosine kinase[J]. Plos Biology, 2005, 3(4):697-704. DOI:10.1371/journal. pbio. 0030123.

444

- [15] ZUEVA E, RUBIO L I, DUCONGÉ F, et al. Metastasis-focused cell-based SELEX generates aptamers inhibiting cell migration and invasion[J]. International Jouranl of Cancer, 2011, 128(4):797-804. DOI:10.1002/ijc.25401.
- [16] ESPOSITO C L, PASSARO D, LONGOBARDO I, et al. A neutralizing RNA aptamer against EGFR causes selective apoptotic cell death[J]. Plos One, 2011, 6(9):e24071. DOI:10.1371/journal. pone. 0024071.
- [17] MAHLKNECHT G, MARON R, MANCINI M, et al. Aptamer to ErbB-2/HER2 enhances degradation of the target and inhibits tumorigenic growth[J]. Proceedings of the National Acadmey of Sciences of the United States of Americal, 2013, 110(20): 8170-8175. DOI: 10. 1073/pnas. 1302594110.
- [18] KOLOVSKAYA O S,ZAMAY T N,ZAMAY A S,et al. DNA-aptamer/protein interaction as a cause of apoptosis and arrest of proliferation in ehrlich ascites adenocarcioma cells[J]. Biologicheskie Membrany,2013,30(5/6):398-411. DOI:10.7868/S023347551305006X.
- [19] CAMORANI S, ESPOSITO C L, RIENZO A, et al. Inhibition of receptor signaling and of glioblastoma-derived tumor growth by a novel PDGFRβ aptamer[J]. Molecular Therapy, 2014, 22(4):828-841. DOI:10.1038/mt.2013. 300.
- [20] ESPOSITO C L, VAN ROOSBROECK K, SANTAMARIA G, et al. Selection of a nuclease-resistant RNA aptamer targeting CD19[J]. Cancers, 2021, 13(20): 5220. DOI:10.3390/cancers13205220.
- [21] MERAVIGLIA-CRIVELLI D, VILLANUEVA H, MENON A P, et al. A pan-tumor-siRNA aptamer chimera to block nonsense-mediated mRNA decay inflames and suppresses tumor progression[J]. Molecular Therapy-Nucleic Acids, 2022, 29:413-425. DOI:10.1016/j. omtn. 2022. 07. 017.
- [22] KELLY L, KRATSCHMER C, MAIER K E, *et al.* Improved synthesis and *in vitro* evaluation of an aptamer ribosomal toxin conjugate[J]. Nucleic Acid Therapeutics, 2016, 26(3):156-165. DOI:10.1089/nat. 2015.0599.
- [23] QIAO Yan, SHI Yanli, JI Mengmeng, et al. Selection and identification of a prohibitin 2-binding DNA aptamer for tumor tissue imaging and targeted chemotherapy[J]. International Journal of Biological Macromolecules, 2024, 259: 129002. DOI:10.1016/j. ijbiomac. 2023. 129002.
- [24] GAO Fei, YIN Jianhui, CHEN Yan, et al. Recent advances in aptamer-based targeted drug delivery systems for cancer therapy[J]. Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2022, 10: 972933. DOI: 10. 3389/fbioe. 2022. 972933
- [25] DUAN Tao, XU Zhuobin, SUN Fumo, et al. HPA aptamer functionalized paclitaxel-loaded PLGA nanoparticles for enhanced anticancer therapy through targeted effects and microenvironment modulation[J]. Biomedicine and Pharmacothrapy, 2019, 117, 109121. DOI: 10. 1016/j. biopha. 2019. 109121.
- [26] MANOOCHEHRI H, JALALI A, TANZADEHPANAH H, et al. Aptamer-conjugated nanoliposomes containing COL1A1 siRNA sensitize CRC cells to conventional chemotherapeutic drugs[J]. Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, 2022, 218:112714. DOI:10.1016/j. colsurfb. 2022. 112714.
- [27] MEHRNIA S S, HASHEMI B, MOWLA S J, et al. Radiosensitization of breast cancer cells using AS1411 aptamerconjugated gold nanoparticles[J]. Radiation Oncology, 2021, 16(1): 33. DOI:10.1186/s13014-021-01751-3.
- [28] WANG Tengfei,LUO Yu,LYU Haiyin, et al. Aptamer-based erythrocyte-derived mimic vesicles loaded with siR-NA and DOX for the targeted treatment of multidrug resistance tumors[J]. ACS Applied Materials and Interface, 2019,11(49):45455-45466. DOI:10.1021/acsami.9b16637.
- [29] BOLTZ A, PIATER B, TOLEIKIS L, et al. Bi-specific aptamers mediating tumor cell lysis[J]. Journal of Biological Chemisty, 2011, 286(24): 21896-21905. DOI: 10.1074/jbc. M111. 238261.
- [30] ZHU Huijie, LI Jin, ZHANG Xiaobin, *et al*. Nucleic acid aptamer-mediated drug delivery for targeted cancer therapy[J]. Chemmedchem, 2014, 10(1): 39-45. DOI: 10. 1002/cmdc. 201402312.
- [31] ZHONG Yi, ZHAO Jiayao, LI Jiazhao, et al. Advances of aptamers screened by Cell-SELEX in selection procedure, cancer diagnostics and therapeutics [J]. Analytical Biochemistry, 2020, 598: 113620. DOI: 10. 1016/j. ab. 2020. 113620.

(责任编辑: 钱筠 英文审校: 刘源岗)

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202402007



多维感知视角下的多元景观研究进展

邱坚珍1,2,林嘉明1,李雅婷1,魏童1

(1. 华南理工大学 建筑学院,广东 广州 510641;2. 华南理工大学 亚热带建筑与城市科学全国重点实验室,广东 广州 510641)

摘要: 为尊重人居环境中景观以人为本、服务于人的体验之核心,从人感知景观的多维视角出发,梳理了多 元景观的概念、缘起及其主要研究方法,归纳了实地调研法、实验室研究法、文献研究法的具体运用。综述了 多元景观目前研究进展,包括理论和实践研究、多元景观的交互和融合研究、多维感知条件下多元景观的相互 影响及多元景观的时空特征,以期为多元景观的研究发展和实践应用提供全面的背景参考。最后,对多元景 观未来的实践与研究进行展望。

关键词: 多元景观;多维感知;景观体验;时空特征 中图分类号: TU 113 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2024)04-0445-09

Research Progress on Multi-Landscapes From Multi-Dimensional Perception Perspective

QIU Jianzhen^{1,2}, LIN Jiaming¹, LI Yating¹, WEI Tong¹

 School of Architecture, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China;
 State Key Laboratory of Subtropical Building and Urban Science, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China)

Abstract: To respect the core of human-centered and serving people experiences in the living environment, starting from the multi-dimensional perspective of human perception landscape, the concept, origin, and main research methods of multi-landscapes are combed, the specific applications of field research method, laboratory research method, and literature research method are summed up. The current research progress on multi-landscapes is reviewed, including the theoretical and practical research, the interaction and integration research of multi-landscapes, the inter influence and the spatiotemporal characteristics of multi-landscapes under multi-dimensional perception conditions, to provide the comprehensive background reference for the research development and practical application of multi-landscapes. Finally, the future practice and research of multi-landscapes are looked forward.

Keywords: multi-dimensional perception; landscape experience; multi-landscape; spatiotemporal characteristics

"景观"一词最初源自于视觉美学,在古希腊时期,哲学家亚里士多德和柏拉图建立了以视觉为中心的感官等级制度,确立了西方哲学的视觉中心主义传统^[1]。因而在相当长的时期,视觉景观成为了景观

收稿日期: 2024-02-21

通信作者: 邱坚珍(1968-),女,高级建筑师,博士,主要从事建筑与环境科学、光景学的研究。E-mail:jzqiu@scut. edu. cn。

基金项目: 华南理工大学亚热带建筑与城市科学全国重点实验室基金资助项目(2022KB06);中国科学院咨询项目 (2018-ZW01-A-031)

研究和实践中几乎唯一的维度。到了二十世纪下半叶,人们越来越意识到非视觉景观的重要性,多感官 体验在环境感知中的作用也开始得到重视^[2]。

《欧洲景观公约》中对"景观"的定义为人们所感知的一个区域,景观的特征表现为自然因素或人为因素,或二者之间相互作用^[3],即景观的范围不仅包括物理层面,也包括感性认知的层面。本文从多维感知的视角,梳理多元景观的概念及缘起,总结国内外多元景观及其融合的研究方法和成果,旨在为当前人居环境建设中多元景观的营造及其融合的发展提供参照。

1 多元景观概述

人有视、听、嗅、尝、触5感^[4],因此,在多维感知的视角下,景观可分为视觉景观、听觉景观、嗅觉景观、触觉景观和味觉景观等。据此,吴硕贤^[5]提出了"多元景观营造与三景融合"的理念,提倡重视声景观、香景观与光景观研究与实践并关注3者融合的方式与效应,且景观的营造须兼顾空间性和时间性两个维度。

声景观最早由芬兰地理学家 Granoe 于 1929 年首次提出,并将声景观定义为以听者为中心的声环 境^[6],20 世纪 60-70 年代,加拿大音乐学家 Schafer 推出并执行的世界声景观计划正式拉开了声景观 研究的序幕^[7]。2014 年,国际标准化组织(ISO)将声景观定义为"个体或社会所感知和理解的声环 境"^[8],当前声景观已经成为了声学和环境研究领域的重要课题,声景观的设计与营造已经在城市公共 空间中发挥着重要的作用^[9]。

嗅觉景观的概念由加拿大地理学家 Porteous 于 20 世纪 80 年代中期提出^[10],将嗅觉景观与视觉景观做对比,把通过嗅觉感知气味的体验定义为嗅觉景观,同时肯定了嗅觉景观作为环境美学研究对象的价值^[11],各国园林中的嗅觉景观均是其中重要的记忆及构成的虚景^[12]。

光景观概念由吴硕贤提出,光景观作为视觉景观中的一个特殊方面,主要由光源、光影及其变化所构成,或由光源、光影及其变化引起强烈视觉印象的景观^[13]。光景观可分为自然光景和人工光景两大类,也包括二者兼有的光景^[14]。

触觉景观主要指人通过手、足、皮肤等器官触碰产生感觉形成的景观^[15]。触摸不同的材质(如石 材、木材、金属等)肌理或水景植物等会带给手部不同触觉,而铺装材料和竖向空间的变化会带给足部触 觉,温湿度的变化及空气流动使人产生皮肤触觉,触觉景观使人与环境产生更多互动,促进了人在环境 中的多层次感知^[16]。

味觉景观是以口腔为媒介,由食物在口腔中产生的味觉感受而形成的景观^[17]。例如,植物不仅通 过外观给人印象,而且还通过味觉传递信息,人对味觉景观的体验不仅来自于味蕾,也来自植物某种特 征出现时所带来的心理感受。因此,味觉景观能够丰富人在场所中的认知和感受^[18]。

从人类大脑的感知特点来看,声景观、光景观、香景观等非实体景观深刻影响人的情感和记忆,例如,月色、教堂钟声等特殊的光景观和声景观均会带来无可替代的乡愁和记忆^[19]。多元景观理念不仅 强调多维度体验,还特别关注各景观之间的相互融合及人与环境之间的多感官交互作用。相比于传统 上单一的视觉景观,多元景观可带来更为深刻和全面的环境体验。

2 多元景观研究方法

多元景观的研究更聚焦于人的体验,多采用定性与定量相结合、主客观结合的手段,包括对体验者的主观、生理感受、客观环境的定性与定量的研究^[20]。研究手段涵括了传统的景观研究学、环境心理学、环境行为学、社会学和文化地理学等及其交叉运用。丰富的研究手段均来自实地研究法、实验室研究法及文献研究法。

2.1 实地研究法

实地研究法指的是在与研究对象相关的现场开展的研究活动,包括田野调查法、现场主客观评价、 物理环境测量及感官漫步等。

2.1.1 田野调查法 田野调查指法是研究者亲身深入到当地社会环境中,了解居民的生活及当地的景

观结构特征,并以本土生活者的视觉进行体验和评价^[21-22]。田野调查法要求研究者亲自实践获取第一 手资料,同时带着假设开展调查,调查结果可以是对假设的验证或否决^[21]。

2.1.2 现场主客观评价 现场主客观评价在实地研究中是常用的基本方法,评价工具包括定性问卷、 访谈等。定性问卷主要关注评价的本质^[23],问卷以语义细分法结合李克特量表进行设计,采取 5~7 个 刻度供判断选择,以定量方式精确地获取主观评价^[24],而特定的环境情感感知模型可以在评价调研中 提高情绪感知数据的精准度,如罗素二维情感感知模型^[25]。

访谈法主要分为结构化访谈、半结构化访谈及探索式访谈,结构化访谈由访谈者主导,探索式访谈 则由受访者主导,半结构化则是在结构化访谈的基础上临时追问一些探索性的问题。

2.1.3 物理环境测量 实地研究常对客观环境中的物理量进行测定,数据的定量分析可作为主观评价 研究的背景资料^[26]。声景研究中的测量声学指标主要包括等效连续 A 声级、峰值及频谱等^[27]。基于 嗅辨仪测量的现场气味浓度常用于嗅觉景观的辅助研究^[28]。光景观研究中的光学指标包括亮度、色温 和照度等^[29],目前,在光环境分析中采用高动态范围成像(HDR)图像技术,较传统的现场仪器测量成本 更低、效率更高^[30]。

2.1.4 感官漫步 感官漫步是在当前景观研究及城市领域研究中运用广泛的手段。感官漫步最早的 案例在 20 世纪 60 年代由 Southworth 实践^[31],感官漫步的优越性在于漫步者可与环境建立更密切连 结,并深化对场地的认识。感官漫步法作为特定时空下的沉浸式体验,在获取对景观的深度认识和即时 反馈时,主观数据的有效性也更高^[32]。

环境感知是感官漫步中最重要的环节,在进行感官漫步过程中,可对漫步者进行系统性的问卷调 查、访谈、直接观察与行为记录;还可采用特定技术对现场环境进行记录,包括拍照、录像、获取地理信息 及相关客观指标,也可在漫步前、后的进行一对一,或一对多的访谈以获取更完善的资料^[33]。

2.2 实验室研究法

实验室研究法相比于现场研究法有其优势,实验条件可控、重复,其劣势是缺乏现场氛围感,尤其在 受环境氛围影响较强或人与景观深交互作用的研究中。研究方法具体包括多元景观的环境模拟评价、 生理效应监测法和眼动追踪法、文献研究法等。

2.2.1 多元景观的环境模拟评价 多元景观的环境模拟评价是在实验室中还原景观特征并引导受试 者完成景观评价的一项技术,已被广泛运用在多元景观的研究中^[34]。

声景观的模拟评价实验应用广泛,在现场采集声音样本后,在实验室以控制声级的方法重放以进行 评价^[35-36],研究的有效性也得到论证^[37-38]。

视觉景观的模拟评价实验主要采用现场拍摄图像后在实验室内重放,供受试者观看并进行评价,这 种图像评价法的认可度也有相当依据^[39-40],大量的视觉景观研究采用了图像评价的方法^[40-41]。

由于完全复制自然气味存在一定难度,嗅觉景观的模拟评价实验多采用在现场记录气味源信息后, 选择该气味源中主要气味成分(精油或香水)调配浓度,嗅觉景观的实验室模拟评价研究也已取得一定 进展^[42-43]。

2.2.2 生理效应监测法与眼动追踪法 生理效应监测法是在实验室中,通过生理记录仪,对受试者人体内环境稳态的生物指标进行测定的方法。应用于景观研究的生理效应监测包括运用脑电图的中枢神 经系统监测^[44],运用心电监测、皮肤电阻监测和呼吸波监测的自主神经系统监测^[45],以及采用唾液采集 免疫系统和内分泌系统监测^[11]。

眼动追踪法采用非侵入式眼动仪捕捉并记录受试者眼球运动轨迹和瞳孔状态,收集受试者的注视轨迹、注视点数量、注视时间及平均瞳孔直径等眼部信息^[46-47],了解被试者对于不同视觉要素刺激作出反应时的身心投入程度和认知程度。

2.3 文献研究法

文献研究法是科学研究的基础性工作,通过梳理古今中外文献资料中的多元景观的历史渊源、人文 精神及发展历程等^[48-49],归纳现有的多元景观研究框架、研究方法和成果^[5,11,13]。在当今学科交叉、融 合的背景下,文献研究法的关键点之一是收集足够多关联学科(如社会地理学、心理学、生物学、医学、植 物学等其他学科)的相关知识背景、研究方法和内容^[40,44]。

3 多元景观研究进展

3.1 多元景观

在声景观、嗅景观、光景观、触觉景观、味觉景观及嗅觉景观等多元景观中,以声景观的研究最为蓬勃。在 21 世纪初,随着欧盟出台的环境噪声评估与管理指令,声景观开始成为热点^[9],同时,嗅觉景观的研究逐渐受到重视^[11]。光景观研究始于 2017 年由吴硕贤正式定义的"光景学"概念,并倡导将其作为与"声景观"及"香景观"并列的学科,近年来。光景观学科已得到国内外学者的重视,其研究与实践也呈现出喜人的态势^[24,50-57],目前触觉景观、味觉景观的研究也有一定进展^[58]。

3.1.1 声景观 声景观学是多元景观研究中最为成熟的学科,其研究方法和手段也对其他多元景观起 到一定的指引。国际标准化组织迄今已正式出版了声景观的概念框架、数据资料收集、报告要求及数据 资料分析等规范性文件,欧盟等发起了大量关于声景观研究的国际性课题,在理论、实践研究、应用等方 面收获丰硕成果^[9]。以声源、空间、人、环境4个基本要素描述声景观的研究框架得以建立^[59]。

在实践研究方面,丰富的地域文化背景下空间类型及人群的声景感知特征的评价研究已全面展 开^[60-64],供设计师和管理者运用的公共开放空间声景观指南已诞生^[9,65],迈出了多元景观研究直接服务 人居建设的重大步伐。

声音数据库及声景地图已被大量应用^[66-67],声景遗产保护、声景观与艺术的跨界合作已成热 点^[68-69]。安静区域已在世界范围内全面推广,基于社会学、心理和生理学、医学等现代学科的交叉学科 为社会治理、生态保护和健康产业带来新的视角^[19-70-71]。声景观的实践研究探索正为学科带来强大的 应用价值,自声景观开展研究以来,声景观生态学一直是备受瞩目的主题。声景观在生态学与人文地理 学等交叉学科的视觉下,把人及其声音视为生态环境的一部分,划分为地球物理声、生物声和人造 声^[72]。关注人造声对动物间的交流及动物的生态行为产生的负面影响^[73-74],通过生物多样性的监测, 研究和评估不同声学指标与生物多样性的相关性^[75-76]。

3.1.2 嗅觉景观 近年来,嗅觉景观的研究取得了若干进展。中国传统园林的香景营造渊源、意匠和 营造手法等得到了较为系统的研究^[48-49],建立基于气味、空间和情感相互关系的嗅觉景观感知模型^[77]。 日本从平安时代开始便盛行香文化,在庭院设计和城市规划中均体现了对嗅觉景观的重视,且早在 2001年开展了评选"香风景 100 例"的活动^[78],许多欧洲国家关于园林植物和城市气味的研究也从未间 断^[11]。在实践研究方面,21 世纪以来,将城市气味的记忆应用于城市感知的探索方兴未艾,城市香景调 查、香景地图等工作已陆续成为香景规划的基础手段^[79]。

城市公园植物香味的浓度与扩散程度、人在室外环境中荷香的感受和评价倾向得到探讨^[80]。气味的保健功能是香景应用的重要领域之一,对香景植物的成分进行检测提炼,芬香成分对于人的生理和心理的积极作用得到证实^[81-82],康复和疗愈花园的实践研究也在许多国家开展^[83]。

3.1.3 光景观 光景观同样聚焦在提升人居环境品质的目标。通过文献研究,自然光景中的月色和萤 火光景^[50-51]、中国古典园林中的光景意匠等得到初步梳理^[52],人文背景下的中国民俗光景^[53]及新时代 背景下的人工光景新形式^[54]也得到关注。

在实践研究方面,若干空间类型场所的评价研究已经展开,大学校园、城市公园、传统历史街区、夜间媒体建筑等场所对象的代表性光景类型及光景感知特征得以探讨^[24,33,54-55]。已有光景观研究均表明,光景观的文化性在欣赏体验、情绪激励等方面有重要作用^[33,56],且在光景观体验中,光学指标的条件与传统光环境中的标准并不完全相符^[54-56]。

"光景漫步"法作为一种行之有效的手段,在城市公共空间、大学校园及城市公园等多种空间形态的 光景观研究中正在发挥作用^[32-33]。

3.1.4 触觉景观与味觉景观 目前触觉景观与味觉景观的研究尚较为零散。

触觉景观最早被用于解决残疾人的需求,例如,在感官花园设计中,材质通常作为触觉景观的表达载体,包括硬质景观和软质景观,硬质景观要素包括石材、铺装、贴面等,软质景观要素包括了植物、水体等^[8+85]。例如,金属、玻璃、织物及生物体带来不同的触觉感受^[86]。

味觉景观的研究相对较少,味觉景观中蕴含了由自然景观中的物质(土壤、气候、水文)带来的自然

属性,以及来自于文化身份认知(包含空间、时间、人物、传统、习俗等一系列要素)的人文属性^[87]。虽然 味觉景观的直接感知通常来自于食用花卉和蔬果、餐饮等,但在景观设计中,还可通过设置味觉花园、社 区花园等植物景观,利用植物的味觉特性对人的心理暗示,从而引发人们对于味觉景观的感知^[58]。

3.2 多元景观的融合及影响

在多元景观的理念下,各景观在环境中绝非孤立而大多是共存的。目前,视觉景观与声景观融合的研究硕果累累,包括在宏观上建立了城市公园中声景观与视觉景观之间较全面的评价交互研究模型和 定量的探讨等^[88],中观上表明了喷泉对空间整体声景评估的影响与人们对喷泉水景和水声接受程度的 关系^[89],微观上表述了喷泉的动态视觉形式与对水景的偏好存在显著的正相关^[90]。

声景观和嗅觉景观融合的研究也较多,包括香气可减少人们对交通噪音的感知,并提升环境中的嗅 听满意度^[91]。当空间中存在积极气味时,积极或消极的声音均会加强人们的趋向行为^[42],而视觉景观 和嗅觉景观存在的交互作用影响整体环境的感知与评价^[92],视觉景观和触觉景观也存在相互作用,区 域的材料、肌理、质感上的视觉设计都会影响触觉体验^[86]。

只有从多维感知的角度探究景观体验才是全面和最真实的,任欣欣等^[46]认为当视觉与听觉感知的 配合度较高时,体验者的声舒适度较高。Zhong 等^[93]提出,高质量的视觉和嗅觉感知可提高声景观的 评价。Mohammadzadeh 等^[94]探究了室外热环境感知对声景感知的影响,发现较高的热感觉会导致声 景感知质量的下降。

另外,多感官交互作用下景观的恢复性近年来已得到相应的重视。研究表明,除普通视觉效应外, 其他感知对恢复性和情绪效益也有显著的影响^[95]。例如,视听交互感知比单一的声景感知具有更强的 恢复性效益^[96];在视、嗅交互感知的作用下,当视觉景观变化时,桂花的恢复性效应会增强^[97];在复愈性 植物景观方面,视、听、嗅三维感知条件下对心理焦虑的恢复性最佳,而视、听感知对于生理复愈的效果 最优^[98]。

3.3 多元景观的时空性特征

相比于传统的视觉景观,多元景观有着尤为突出的空间和时间二维特征,即在景观营造中应体现时 时美好、处处美好^[5]。景观的空间维度指在不同的空间、地域及地形地貌等环境下不同的形态呈现,而 景观的时间维度则指景观随不同的时间尺度而呈现的变化,时间尺度包括日、月、四季,也可是秒、分、小 时等更小的尺度,或年、十年、世纪等更大的时间尺度。例如,在扬州个园中,不同时间段内的动物声、植 物香、自然光变化使园林景致时时不同,配合蜿蜒曲折路径和收放自如的空间,营造了富有变化的诗意 园林景观^[39]。

在多元景观时空性的实践研究方面已有相应展开,刘江等^[100]发现声景的物理指标与声源和谐度 在时空尺度上同时存在不同程度的动态变化与差异。He 等^[101]研究了城市公园中嗅觉景观的时间变 化与人类活动的关系。邱坚珍等^[33]对比大学校园日间和夜间典型光景的类型及其喜爱度差异,提出应 对不同时段的光景进行针对性的优化。

4 结束语

完整的景观体验通过"五感"综合作用于人的感官和心灵,多元景观理论强调景观的多元性,关注景观在物理、心理层面之上的情感效应,围绕人在时间和空间两个维度的体验展开,核心是以人为本的思想。多元景观不仅可丰富人们的欣赏和体验感,还可在健康疗愈、恢复性等方面发挥效应。在当前"提升人居环境品质"已上升至国策高度、规划-建筑-景观日益一统化的设计和建设背景下,重视多元景观 及其融合,拓展多元景观与关联学科的交叉研究和实践,使学术回归优化人居环境品质,从而提升人民生活福祉水平。

参考文献:

- [1] PALLASMAA J. The eyes of the skin: Architecture and the senses[M]. New York: John Wiley and Sons, 2005.
- [2] TUAN Y. Topophilia: A study of environmental perception, attitudes, and values[M]. New York: Columbia University Press, 1974.

- [3] Council of European Landscape Convention[EB/OL]. (2000-10-20)[2024-01-03]. http://conventions.coe. int/Treaty/en/Treaties/Html/176. htm.
- [4] 吴硕贤.园林声景略论[J].中国园林,2015,31(5):38-39.
- [5] 吴硕贤. 三景融合与中国古典园林多元景观构成[J]. 南方建筑,2022(10):1-4. DOI:10. 3969/j. issn. 1000-0232. 2022.10.001.
- [6] 康健,杨威.城市公共开放空间中的声景[J].世界建筑,2002(6):76-79.DOI:10.16414/j.wa.2002.06.013.
- [7] WRIGHTSON K. An introduction to acoustic ecology[J]. Soundscape: The Journal of Acoustic Ecology, 2000, 1 (1):10-13.
- [8] INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. Acoustics-soundscape (part 1): Definition and conceptual framework: ISO 12913-1:2014 [S]. Geneva: International Organisation for Standardization, 2014.
- [9] 邱坚珍,康健,吴硕贤.欧洲声景研究与实践进程[J].中国园林,2022,38(12):58-63. DOI:10.19775/j.cla.2022. 12.0058.
- [10] PORTEOUS J D. Smellscape[J]. Progress in Physical Geography, 1985, 9(3): 356-378. DOI: 10. 1177/03091333 8500900303.
- [11] 陈意微,袁晓梅. 气味景观研究进展[J]. 中国园林,2017,33(2):107-112.
- [12] 吴硕贤,邱坚珍.对我国人居环境建设的若干建议[J].城市规划学刊,2022(5):29-31. DOI:10.16361/j.upf. 202205004.
- [13] 吴硕贤.光景学发凡[J].南方建筑,2017(3):4-6. DOI:10.3969/j.issn.1000-0232.2017.03.004.
- [14] 邱坚珍,吴硕贤.光景学与建筑中的光景[J].建筑学报,2017(9):115-118. DOI:10.3969/j.issn.0529-1399.2017. 09.019.
- [15] KABAT-ZINN J. Touchscape[J]. Mindfulness, 2013(4):389-391. DOI:10.1007/s12671-013-0252-4.
- [16] 丹尼尔·罗尔,魏菲宇,肖恩·贝利.将"感官体验漫步分析"用于多重感官体验的风景园林教学[J].风景园林, 2021,28(10):96-106. DOI:10.14085/j.fjyl.2021.10.0096.11.
- [17] KABAT-ZINN J. Tastescape[J]. Mindfulness, 2014, 5(1):102-104. DOI:10.1007/s12671-013-0274-y.
- [18] 彭阳陵. 植物触觉、味觉、嗅觉特征在园林景观中的心理暗示效应研究[J]. 湖北科技学院学报,2012,32(7):101-102. DOI:10.16751/j. cnki. hbkj. 2012.07.046.
- [19] WU Shuoxian, QIU Jianzhen. "Reading", "listening" and sound, light environment[J]. City and Built Environment, 2024, 2(1):1. DOI:10.1007/s44213-023-00022-z.
- [20] 何谋, 庞弘. 声景的研究与进展[J]. 风景园林, 2016(5): 88-97. DOI: 10. 14085/j. fjyl. 2016. 05. 0088. 10.
- [21] 任欣欣,康健.中英乡村旅游者的声喜好比较研究[J].新建筑,2014(5):114-117. DOI:10.3969/j.issn.1673-0232. 2016.28.020.
- [22] KANG Jian, ZHANG M. Semantic differential analysis of the soundscape in urban open public spaces [J]. Journal of the Acoustical Society of America, 2010, 45(1):150-157.
- [23] BRAMBILLA G,GALLO V,ZAMBON G. The soundscape quality in some urban parks in Milan, Italy [J]. International Journal of Environmental Research and Public Health, 2013 (10): 2348-2369. DOI: 10. 3390/ijerph1006234810.3390/ijerph10062348.
- [24] 陈冉鹏,邱坚珍.历史街区光景感知评价研究:以广州西关永庆坊区域为例[J].建筑与文化,2022(5):175-179. DOI:10.19875/j.cnki.jzywh.2022.05.062.
- [25] CHAMILOTHORI K, WIENOLD J, ANDERSEN M. Adequacy of immersive virtual reality for the perception of daylit spaces. Comparison of real and virtual environments[J]. LEUKOS, 2019, 15(2/3): 203-226. DOI: 10.1080/ 15502724. 2017. 1404918.
- [26] 康健. 从分贝到声景指标:管理我们的声环境[J]. 工程管理年刊,2017,7:114-125.
- [27] 中国环境科学研究院. 声环境质量标准: GB 3096-2008[S]. 北京:中国环境科学出版社, 2008.
- [28] HENSHAW V. Urban smellscapes: Understanding and designing city smell environments[M]. New York: Routledge, 2013.
- [29] 中国建筑科学研究院有限公司.照明测量方法:GB/T 5700-2023[S].北京:中国标准出版社,2023.
- [30] BELLIA L, SPADA G, PEDACE A. Lit environments quality: A software for the analysis of luminance maps obtained with the HDR imaging technique[J]. Energy and Buildings, 2013, 67: 143-152. DOI: 10. 1016/j. enbuild. 2013. 08. 007.

- [31] SOUTHWORTH M F. The sonic environment of cities[D]. Cambridge: Massachusetts Institute of Technology, 1967.
- [32] 邱坚珍,李雅婷,陈嘉燕.从声景漫步到光景漫步:探索环境的多样化手段[J].西部人居环境学刊,2021,36(1): 108-115. DOI:10.13791/j. cnki. hsfwest. 20210114.
- [33] 邱坚珍,魏童,李雅婷.光景漫步法下的高校户外光景感知研究:以华南理工大学五山校区为例[J].南方建筑, 2022(12):83-92. DOI:10.3969/j.issn.1000-0232.2022.12.010.
- [34] 马克·林奎斯特,埃卡特·兰格,唐真.风景园林中的多感官体验:从景观可视化到环境模拟[J].中国园林,2013, 29(5):17-21.
- [35] TARLAO C, STEELE D, GUASTAVINO C. Assessing the ecological validity of soundscape reproduction in different laboratory settings[J]. Plos One, 2022, 17(6); e0270401. DOI:10.1371/journal. pone. 0270401.
- [36] BJERRE L C, LARSEN T M, SØRENSEN A J, et al. On-site and laboratory evaluations of soundscape quality in recreational urban spaces[J]. Noise and Health, 2017, 19(89):183. DOI:10. 4103/nah. NAH_109_16.
- [37] HERMIDA C L F,LOBO S A C,PAVÓN I, et al. Assessing soundscape: Comparison between in situ and laboratory methodologies[J]. Noise Map,2017,4(1):57-66. DOI:10.1515/noise-2017-0004.
- [38] 廉英奇,欧达毅,潘森森.实验室模拟与实地调查的声景评价对比研究[J].建筑科学,2021,37(8):139-144. DOI: 10.13614/j. cnki. 11-1962/tu. 2021. 08. 18.
- [39] ARRIAZA M, CAÑAS-ORTEGA J F, CAÑAS-MADUEÑO J A, *et al.* Assessing the visual quality of rural landscapes[J]. Landscape and Urban Planning, 2004, 69(1):115-125. DOI:10.1016/j. landurbplan. 2003. 10. 029.
- [40] KAPLAN S, KAPLAN R. The experience of nature: A psychological perspective[M]. New York: Cambridge University Press, 1989.
- [41] DANIE T C. Whither scenic beauty?: Visual landscape quality assessment in the 21st century[J]. Landscape and Urban Planning, 2001, 54(1/2/3/4):267-281. DOI:10.1016/S0169-2046(01)00141-4.
- [42] 巴美慧,康健.嗅听交互作用下的城市公共开放空间感知及行为研究 [J]. 南方建筑,2022(10):19-29. DOI:10. 3969/j.issn.1000-0232.2022.10.003.
- [43] 巴美慧. 城市公共开放空间的嗅听交互研究[D]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学,2021.
- [44] 张琪,周延祯,屠海燕.脑电技术在风景园林领域的应用研究现状综述[J].南方建筑,2023(5):75-83. DOI:10. 3969/j.issn.1000-0232.2023.05.009.
- [45] LI Zhongzhe, KANG Jian. Sensitivity analysis of changes in human physiological indicators observed in soundscapes
 [J]. Landscape and Urban Planning, 2019, 190:103593. DOI:10.1016/j. landurbplan. 2019.103593.
- [46] 任欣欣,康健. 声景视角下湿地景观视听评价的交互影响[J]. 建筑学报, 2016(增刊 2):7-11.
- [47] 谢琦,曲菲.未来小学泛学习空间多感官认知评估与设计策略[J].新建筑,2022(6):12-18. DOI: 10.12069/j.na. 202206012.
- [48] 陈意微,袁晓梅.明清江南园林典型植物香景营造意匠[J].建筑学报,2018(2):7-13.DOI:10.3969/j.issn.0529-1399.2018.02.002.
- [49] 张婷,金荷仙. 以多元历史文献为解读文本的宋代植物香景营造研究[J]. 中国园林, 2023, 39(6):139-144. DOI: 10.19775/j. cla. 2023. 06. 0139.
- [50] 邱坚珍,李雅婷.光景学语境下的月色思想[J].建筑与文化,2020(10):225-228. DOI:10.19875/j. cnki. jzywh. 2020.10.075.
- [51] 邱坚珍,陈冉鹏. 萤光光景及其景观构建[J]. 古建园林技术,2021(3):59-62.
- [52] 邱坚珍,李雅婷.中国传统园林中的光景[J].中国园林,2018,34(5):136-139.
- [53] 邱坚珍,吴继红.夜间光景的文化性营造:来自民俗光文化的启示[J].照明工程学报,2021,32(4):142-147.DOI: 10.3969/j.issn.1004-440X.2021.04.022.
- [54] 裴陆琦.媒体建筑夜间光景表述及其评价研究[D].广州:华南理工大学,2022.
- [55] 陈冉鹏,邱坚珍. 广州荔湾湖公园区域光景感知评价研究[J]. 南方建筑,2022(6):34-42. DOI:10.3969/j. issn. 1000-0232.2022.06.005.
- [56] 邱坚珍,陈嘉燕,李雅婷.广州花城广场光景评价研究[J].南方建筑,2020(3):94-100. DOI:10.3969/j.issn.1000-0232.2020.03.094.
- [57] 袁晓梅,邱坚珍,陈意微,等.华南理工大学"三景"研究成果述要[J].南方建筑,2022(10):5-18.DOI:10.3969/j. issn.1000-0232.2022.10.002.

- [58] 奚露,邱尔发,张致义,等.国内外五感景观研究现状及趋势分析[J].世界林业研究,2020,33(4):31-36.DOI:10. 13348/j. cnki. sjlyyj. 2019.0124. y.
- [59] ZHANG Mei, KANG Jian. Towards the evaluation, description, and creation of soundscapes in urban open spaces[J]. Environment and Planning B: Planning and Design, 2007, 34(1):68-86. DOI:10.1068/b31162.
- [60] KANG J, SCHULTE-FORTKAMP B. Soundscape and the built environment[M]. Boca Raton: CRC press, 2018.
- [61] YU Boya, KANG Jian, MA Hui. Development of indicators for the soundscape in urban shopping streets[J]. Acta Acustica United With Acustica, 2016, 102(3):462-473. DOI:10.3813/AAA.918965.
- [62] KURUKOSECAL H K,KANG J,ALETTA F. Methodological approaches and main factors considered in school soundscape studies: A scoping review[J]. Building Acoustics, 2024, 31(1):75-90. DOI: 10.1177/1351010X23121 6016.
- [63] WANG Bin, KANG Jian, ZHAO Wei. Noise acceptance of acoustic sequences for indoor soundscape in transport hubs[J]. The Journal of the Acoustical Society of America, 2020, 147(1):206-217. DOI:10.1121/10.0000567.
- [64] KANG Jian, MENG Qi, JIN Hong. Effects of individual sound sources on the subjective loudness and acoustic comfort in underground shopping streets[J]. Science of the Total Environment, 2012, 435:80-89. DOI:10.1016/j. scitotenv. 2012. 06. 105.
- [65] KANG Jian. Soundscape in city and built environment: Current developments and design potentials[J]. City and Built Environment, 2023, 1(1):1-16. DOI:10.1007/s44213-022-00005-6.
- [66] KANG J, ALETTA F, MARGARITIS E, et al. A model for implementing soundscape maps in smart cities[J]. Noise Mapping, 2018, 5(1): 46-59. DOI: 10.1515/noise-2018-0004.
- [67] ALETTA F, KANG J. Soundscape approach integrating noise mapping techniques: A case study in Brighton, UK [J]. Noise Mapping, 2015, 2(1):1-12. DOI:10.1515/noise-2015-0001.
- [68] HUANG Lingjiang, KANG Jian. The sound environment and soundscape preservation in historic city centres: The case study of Lhasa[J]. Environment and Planning B: Planning and Design, 2015, 42(4):652-674. DOI:10.1068/b130073p.
- [69] BARBOSA A. Displaced soundscapes: A survey of network systems for music and sonic art creation[J]. Leonardo Music Journal, 2003, 13(1):53-59. DOI:10.1162/096112104322750791.
- [70] ERFANIAN M, MITCHELL A J, KANG J, *et al*. The psychophysiological implications of soundscape: A systematic review of empirical literature and a research agenda[J]. International Journal of Environmental Research and Public Health, 2019, 16(19): 3533. DOI: 10.3390/ijerph16193533.
- [71] ALETTA F, OBERMAN T, KANG J. Associations between positive health-related effects and soundscapes perceptual constructs: A systematic review[J]. International Journal of Environmental Research and Public Health, 2018, 15(11):2392. DOI:10.3390/ijerph15112392.
- [72] PIJANOWSKI B C, VILLANUEVA-RIVERA L J, DUMYAHN S L, et al. Soundscape ecology: The science of sound in the landscape[J]. BioScience, 2011, 61(3): 203-216. DOI: 10.1525/bio. 2011. 61. 3. 6.
- [73] SMOTT S, MONCZAK A, MILLER M E, et al. Boat noise in an estuarine soundscape-a potential risk on the acoustic communication and reproduction of soniferous fish in the May River, South Carolina[J]. Marine Pollution Bulletin, 2018, 133:246-260. DOI:10.1016/j. marpolbul. 2018. 05. 016.
- [74] LECCHINI D, BERTUCCI F, GACHE C, et al. Boat noise prevents soundscape-based habitat selection by coral planulae[J]. Scientific Reports, 2018, 8(1):9283. DOI:10.1038/s41598-018-27674-w.
- [75] BUXTON R T, MCKENNA M F, CLAPP M, *et al*. Efficacy of extracting indices from large-scale acoustic recordings to monitor biodiversity[J]. Conservation Biology, 2018, 32(5):1174-1184.
- [76] HARRIS S A, SHEARS N T, RADFORD C A. Ecoacoustic indices as proxies for biodiversity on temperate reefs [J]. Methods in Ecology and Evolution, 2016, 7(6):713-724.
- [77] XIAO J, TAIT M, KANG J. Understanding smellscapes: Sense-making of smell-triggered emotions in place[J]. Emotion, Space and Society, 2020, 37:100710.
- [78] 卢韵琴,孙小迪,吴硕贤,等.《日本香景 100 选》的解读与拓展[J]. 南方建筑,2022(10):55-59. DOI:10.3969/j. issn. 1000-0232.2022.10.007.
- [79] QUERCIA D, SCHIFANELLA R, AIELLO L M, et al. Smelly maps: The digital life of urban smellscapes[C]// Proceedings of the International AAAI Conference on Web and Social Media. 2015,9(1):327-336. DOI:10.1609/
icwsm. v9i1. 14621.

- [80] 陈蕴仪,黄靖雯,陈意微.顺德清晖园荷池香景感知评价研究[J].广东园林,2023,45(1):17-21.DOI:10.12233/j. gdyl.2023.01.005.
- [81] 金荷仙.梅、桂花文化与花香之物质基础及其对人体健康的影响[D].北京:北京林业大学,2003.
- [82] 高翔,姚雷.特定芳香植物组合对降压保健功能的初步研究[J].中国园林,2011,27(4):37-38. DOI:10.3969/j. issn. 1000-6664.2011.04.009.
- [83] PÁLSDÓTTIR A M,SPENDRUP S,MÅRTENSSON L, et al. Garden smell scape-experiences of plant scents in a nature-based intervention[J]. Frontiers in Psychology, 2021, 12:667957. DOI:10.3389/fpsyg. 2021.667957.
- [84] 卢渊,朱书强. 触觉景观在居住区中的应用[J]. 山西建筑, 2015, 41(12): 206-208. DOI: 10. 13719/j. cnki. cn14-1279/tu. 2015. 12. 114.
- [85] 周延伟.景观设计中的触觉体验研究[J].设计,2017(14):131-133. DOI:10.3969/j.issn.1003-0069.2017.14.042.
- [86] 史小蕾,梅洪元.感官体验:一种面向知觉建构的寒地建筑设计思考方式[J].世界建筑,2020(11):84-87. DOI: 10.16414/j.wa.2020.11.017.
- [87] 伊琳娜.味觉景观:关于自然文化景观遗产保护的探讨[J].建筑与装饰,2021,7(21):11-12.
- [88] 刘江,郁珊珊,王亚军,等.城市公园景观与声景体验的交互作用研究[J].中国园林,2017,33(12):86-90.
- [89] 苏婳,康健. 喷泉视听感知对城市开放空间声景评估的影响[J]. 应用声学,2021,40(5):668-675. DOI:10.11684/j. issn. 1000-310X. 2021.05.003.
- [90] YANG Xiaoyin, KANG Jian. The effect of visual and acoustic factors on the sound preference for waterscapes in urban public spaces[J]. Applied Acoustics, 2022, 197:108945. DOI: 10.1016/j. apacoust. 2022. 108945.
- [91] BA Meihui, KANG Jian. Effect of a fragrant tree on the perception of traffic noise[J]. Building and Environment, 2019, 156:147-155. DOI:10.1016/j. buildenv. 2019. 04. 022.
- [92] 齐莹,陈曲靖,高天,等.基于语义差异法的视嗅景观评价影响研究[C]//中国风景园林学会 2021 年会论文集.北京:中国建筑工业出版社,2021:33-38. DOI:10.26914/c. cnkihy. 2021.068212.
- [93] ZHONG Bingzhi, XIE Hui, GAO Tian, *et al*. The effects of spatial characteristics and visual and smell environments on the soundscape of waterfront space in mountainous cities [J]. Forets, 2013, 14 (1): 1-18. DOI: 10. 3390/f14010010.
- [94] MOHAMMADZADEH N, KARIMI A, BROWN R D. The influence of outdoor thermal comfort on acoustic comfort of urban parks based on plant communities[J]. Building and Environment, 2023, 228, 109884. DOI: 10.1016/j. buildenv. 2022. 109884.
- [95] 郝石盟,王晨,侯锐,等.虚拟疗愈环境及其疗愈效益研究进展[J].风景园林,2022,29(8):79-85. DOI:10.14085/j. fjyl.2022.08.0079.07.
- [96] GUO Xuan, LIU Jiang, ALBERT C, et al. Audio-visual interaction and visitor characteristics affect perceived soundscape restorativeness: Case study in five parks in China[J]. Urban Forestry and Urban Greening, 2022, 77: 127738. DOI:10.1016/j. ufug. 2022. 127738.
- [97] 吴晓云,黄倩,金荷仙.基于视嗅感知的校园绿地恢复性研究[J]. 园林,2023,40(6):38-45. DOI:10.12193/j. laing. 2023.06.0038.005.
- [98] 张筱婉.基于视、听、嗅多维度感知的大学生复愈性植物景观循证设计研究[D].咸阳:西北农林科技大学,2022.
- [99] 吴硕贤.中国古典园林的时间性设计[J].南方建筑,2012(1):4-5. DOI:10.3969/j.issn.1000-0232.2012.01.004.
- [100] 刘江,朱天媛,洪昕晨.城市森林公园声源感知的时空动态与空间依赖性特征研究[J].中国园林,2022,38(12): 64-69. DOI:10.19775/j.cla.2022.12.0064.
- [101] HE Jihong, HAO Zezhou, LI Le, et al. Sniff the urban park: Unveiling odor features and landscape effect on smellscape in Guangzhou, China [J]. Urban Forestry and Urban Greening, 2022, 78: 127764. DOI: 10. 1016/j. ufug. 2022. 127764.

(责任编辑:陈志贤 英文审校:方德平)

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202403025



大客车尾翼的数值模拟与风洞试验

杨永柏¹,王靖宇²,庄国华³

(1. 华侨大学 机电及自动化学院,福建 厦门 361021;2. 吉林大学 汽车动态模拟国家重点实验室,吉林 长春 130025;3. 厦门金龙联合汽车工业有限公司,福建 厦门 361023)

摘要: 为了研究尾翼对大客车气动特性的影响,采用数值模拟和风洞试验相结合的方法,从造型方案、位置 布置、倾角变化等方面对大客车量产实车的3种尾翼进行研究。结果表明:布置在车身后围,与后围曲面过渡 平顺,距后围距离恰当,倾角合适的尾翼能达到较好的减阻效果,可减小11.8%的气动阻力,产生一定节能效 果,并具有后窗除尘的作用。

关键词: 大客车;尾翼;风洞试验;气动特性;数值模拟 中图分类号: U 461.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2024)04-0454-07

Numerical Simulation and Wind Tunnel Testing of Coach Rear Spoiler

YANG Yongbai¹, WANG Jingyu², ZHUANG Guohua³

(1. College of Mechanical Engineering and Automation, Huaqiao University, Xiamen 361021, China;

State Key Laboratory of Automotive Simulation and Control, Jilin University, Changchun 130025, China;
 Xiamen Kinglong United Automotive Industry Limited Company, Xiamen 361023, China)

Abstract: To investigate the effect of rear spoiler on the aerodynamic characteristics of a coach, a combined method of numerical simulation and wind tunnel testing was employed. This study examined three types of rear spoiler for mass-produced coaches in terms of design schemes, positional arrangements and variations in inclination angles. The results indicated that a rear spoiler positioned on the rear wall of the coach body, with a smooth transition to the curved surface of the rear wall, an optimal distance from the rear wall, and an appropriate inclination angle, achieved significant drag reduction. Specifically, it reduced aerodynamic drag by 11. 8%, produced energy-saving effects and facilitated dust removal in rear window.

Keywords: coach; rear spoiler; wind tunnel test; aerodynamic characteristics; numerical simulation

随着我国高速公路的发展,大客车的平均行驶速度不断增加,气动阻力对整车油耗的占比也随之增大,气动减阻变得更加重要。目前,空气动力学附加装置已广泛应用于乘用车和货车,并取得良好的效果^[1-12],但在商用客车上应用较少。此外,由于大客车车身造型与乘用车、货车有较大差异,无法直接移植乘用车和货车的空气动力学附加装置,需根据其自身特点进行研究^[13]。国内学者已就大客车的前围造型、圆角半径、尾部倾角等细部结构进行深入细致的试验和模拟研究^[14-17],但对空气动力学附加装置的研究较少,且少有实车的实际应用研究。基于此,本文对一款量产实车进行尾翼方案的数值模拟与风洞试验研究。

收稿日期: 2024-03-29

基金项目: 华侨大学高层次人才科研启动项目(09BS613)

通信作者: 杨永柏(1971-),男,讲师,博士,主要从事汽车空气动力学的研究。E-mail:yyb717717@163.com。

1 风洞试验

1.1 试验设备

在吉林大学汽车风洞试验室进行试验,该风洞为回流式风洞,有模拟地面效应的移动带装置,试验 段尺寸(长×宽×高)为 8.0 m×4.0 m×2.2 m。

1.2 试验模型

选取1:5的实车缩比模型,客车试验模型,如图1所示。图1中:X,Y,Z表示车身坐标。采用数控机床加工, 与实车几何相似,装有后视镜、雨刷器、天窗与空调等附属 装置,忽略了发动机舱、车身底部细部结构。

3 种尾翼方案的造型和安装位置,如图 2 所示。图 2 中:尾翼用于干扰尾流,尾翼 1 安装于后围,尾翼 2,3 安装 于顶盖。



(a) 尾翼 1





图 1 客车试验模型 Fig.1 Test model of coach



(c) 尾翼 3

 $\varphi/(°)$

 $0, \pm 5, \pm 10, \pm 15$

 $v/\mathrm{km} \cdot \mathrm{h}^{-1}$

100

100

100

100

(b) 尾翼 2
图 2 3 种尾翼方案的造型和安装位置

Fig. 2 Designs and installation positions of three rear spoiler

1.3 试验内容

风洞试验主要是让安装不同尾翼的模型在各种横摆角情况下进行测力试验(横摆角试验主要是为 了研究侧风的影响)。风洞试验方案,如表1 表1 风洞试验方案 所示。表1中:φ为横摆角;v为风速。 Tab.1 Scheme of wind tunnel testing

试验模型

原模型

原模型+尾翼1

原模型+尾翼2

原模型+尾翼3

1.4 试验结果分析

当风速为 100 km • h⁻¹时,不同尾翼造型 下阻力系数随横摆角的变化,如图 3 所示。图 3 中:C_d为阻力系数。由图 3 可知:车身加装 尾翼后,阻力系数不一定会降低,阻力系数变

化情况与尾翼造型有关;尾翼1具有较好的减阻效果, 尾翼2,3未起到减阻作用,反而使气动阻力增加;当横 摆角度为0°时,与原模型相比,尾翼1使阻力系数降低 了2.58%,尾翼2使阻力系数增加了7.38%,尾翼3使 阻力系数增加了4.93%。这是因为尾翼1布置于后围, 将车顶来流更顺畅地导向后围,减少气流分离,减小车 尾尾涡,降低阻力;尾翼2,3布置于车顶,自身产生了一 定的形状阻力,未能很好地引导气流流向后围,致使阻 力增加。



图 3 不同尾翼造型下阻力系数随横摆角的变化 Fig. 3 Variation of drag coefficients with yawing angles under different rear spoiler designs

2 数值模拟

对风洞试验中的原模型和3种尾翼方案进行仿真分析。

2.1 网格划分

建立计算域后,采用 STAR-CCM+的切面体网格模型(Trimer)生成体网格,车身表面拉伸 6 层边 界层,并对车身表面和尾翼部位进行加密处理,总网格数约为 1 200 万。

车身对称面网格,如图4所示。尾翼网格加密,如5所示。







2.2 计算设置

计算边界条件设置:速度入口为100 km・h⁻¹;出口为压力出口;底面为滑移壁面;左右侧面及顶面 为固定壁面;车身表面为固定壁面。湍流模型为 SST-*k*-ω。

2.3 计算结果分析

2.3.1 车身表面压力 车身表面压力(*p*)分布,如图 6 所示。由图 6 可知:空调、天窗迎风面存在较大的正压区,产生较大形状阻力,使总阻力比无空调、天窗时增加了 12.5%。

车身表面的流线分布,如图7所示。由图7可知:气流在空调及天窗转角处都发生了分离,而这部 分分离的气流沿着车身向后发展,与尾流混合在一起,使尾流变得更加复杂。



图 6 车身表面压力分布

图 7 车身表面流线分布

Fig. 6 Pressure distribution on surface of coach body Fig. 7 Streamlines distribution on surface of coach body 2.3.2 尾翼方案对比 1)阻力系数变化。通过模拟计算,可得 3 种尾翼相对于未加尾翼的阻力系数 变化,如表 2 所示。表 2 中: $\Delta C_{d,s}$ 为数值模拟阻力系数变化; $\Delta C_{d,t}$ 为风洞试验阻力系数变化。由表 2 可 知:尾翼 1 可降低客车的阻力系数,尾翼 2,3 使客车的阻力系数增加,模拟结果与试验结果相差无几。 这表明采用的模拟方案可行,后续的尾翼优化也沿用此方案。

表 2	3	种尾翼	阻力	系数变	化
-----	---	-----	----	-----	---

Tab. 2 Variation of drag coefficients of three rear spoilers

参数	尾翼 1	尾翼 2	尾翼 3
$\Delta C_{ m d,s}$ / %	-2.38	+8.85	+5.17
$\Delta C_{ m d,t}$ / %	-2.58	+7.38	+4.93

2) 车身压力图、速度图分析。车身尾部压力分布图,如图8所示。由图8可知:尾翼3安装于车顶,其迎风面存在正压区,产生形阻,造成整车阻力增加(尾翼2情况类似);尾翼1位于后围,具有扰动 尾流的作用,达到一定的减阻效果。



(a) 尾翼 1

(b) 尾翼 3

图 8 车身尾部压力分布图

Fig. 8 Pressure distribution diagram at rear of coach body

车身尾部纵向对称面的速度分布图,如图 9 所示。由图 9 可知:未加尾翼之前,车身尾部后面尾涡 区域(红色区域)较大,采用尾翼 1 后,尾涡区域明显减少,尾涡能量耗散减少,这对减少客车阻力是有利 的;采用尾翼 2,3 后,车身尾部尾涡虽有改善,但在靠近尾翼 2,3 区域却出现尾涡,故车身阻力增大。



图 9 车身尾部纵向对称面的速度分布图

Fig. 9 Velocity distribution diagram of longitudinal symmetrical plane at rear of coach body

2.3.3 尾翼优化 由以上风洞试验和数值模拟可知,尾翼1有一定减阻效果。为了得到更好的减阻效果,对尾翼1进行优化,优化工作主要从造型和安装位置两方面展开。

1) 造型优化。为了使气流不在尾翼与后围结合处发生分离,对其进行修改。

尾翼1修改前、后的侧视图,如图10所示。由图10可知:修改后尾翼过渡更加平顺,且将尾翼前、 后沿尖角倒圆。

将尾翼截面的三角形形状下端一角截断,使其截面由三角形变为四边形。尾翼修改前、后尾部对称 面速度分布图,如图 11 所示。由图 11 可知:尾翼修改后,阻力下降 11.8%,原因是尾翼修改后,尾翼后 方的尾涡变小,故阻力变小。



(a) 修改前

458

(b) 修改后

图 10 尾翼 1 修改前、后的侧视图





(a) 修改前

(b) 修改后

L=48.67 mm

图 12 尾翼与后围之间的距离示意图

Fig. 12 Schematic diagram of distance

between rear spoiler and rear wall

图 11 尾翼修改前、后尾部对称面速度分布图

Fig. 11 Velocity distribution diagram of rear symmetrical plane before and after modification of rear spoiler

2) 安装位置优化。i) 调整尾翼与后围的距离。尾 翼与后围的距离示意图,如图 12 所示。图 12 中:L 为尾 翼与后围的距离。

经计算可知,尾翼与后围的距离分别为10,20,30, 40,48.67,50,80,100 mm,对应的阻力系数变化分别为 0%,0%,-0.16%,0%,0%,0%,+0.32%,+0.48%。

由此可知,随着尾翼与后围的距离的变化,阻力系数 基本没有变化。

尾部对称面的速度分布,如图 13 所示。

由图 13 可知:当 *L*=10 mm 时,由于尾翼与后围间隙 较小,气流无法通过间隙;当 *L*≥80 mm 时,气流直接掠过

尾翼,流向车尾;当 20 mm≪L≪50 mm,顶盖干净的气流通过间隙冲刷后窗玻璃尘土,起到除尘作用。 因此,尾翼与后围的设计距离可以定为 20~50 mm。



(a) L = 10 mm







(d) L = 40 mm



(e) L = 50 mm

图 13 尾部对称面的速度分布

(f) L = 80 mm



 ii)调整尾翼倾角。将尾翼与水平面间夹角(即尾 翼倾角θ)改变为4°,8°,12°,16°,20°,25°,车尾不同尾翼 倾角示意图,如图14所示。

不同尾翼倾角下阻力系数的变化,如表3所示。

由表 3 可知:尾翼倾角从 4°增加到 16°,整车阻力系 数呈下降趋势;尾翼倾角从 16°增加到 25°,阻力系数呈 上升趋势;当尾翼倾角为 16°时,相对不加尾翼的车身, 阻力系数下降最多,达 11.8%。

文献[18]的结果表明,客车风阻系数降低 10%以上,油耗可降低 4%以上,100 km 油耗可节省约 1.0~1.5 L,节能效果较为可观。



(g) L = 100 mm

图 14 车尾不同尾翼倾角示意图

Fig. 14 Schematic diagram of different inclination angles of rear spoiler at rear of coach

表 3 不同尾翼倾角	下阻力系数的变化
------------	----------

Tab. 3	Variation of dr	ag coefficients	under different	inclination	angles of	rear spoiler
--------	-----------------	-----------------	-----------------	-------------	-----------	--------------

参数	原模型	$\theta = 4^{\circ}$	$\theta = 8^{\circ}$	$\theta = 12^{\circ}$	$\theta = 16^{\circ}$	$\theta = 20^{\circ}$	$\theta = 25^{\circ}$
$\Delta C_{\rm d}$ / $\%$	0	-6.4	-6.2	-9.5	-11.8	-9.5	-1.4

3 结论

对大客车尾翼进行风洞试验和数值模拟研究,并对尾翼进行优化,可得以下3个结论。

1) 尾翼最好布置在后围,以避免布置在顶盖部位产生形阻。

2) 尾翼与车身的结合部应尽量平顺,外形边角尽量圆滑化,避免出现尖的棱角。

3) 尾翼在后围的安装位置也需优化,使其达到最佳气动效果,如优化后可有利于后风窗除尘,并可 减阻 11.8%,节能效果明显。

参考文献:

[1] 邵景峰, 左辉辉, 胡兴军. 某 SUV 气动减阻优化及其流场机制[J]. 汽车工程, 2024, 46(2): 356-365. DOI: 10. 19562/

j. chinasae. qcgc. 2024. 02. 018.

- [2] 查云飞,石小山,吴昊,等. 基于主动倾斜式尾翼的车辆气动特性研究[J]. 汽车工程,2023,45(3):489-500. DOI:10. 19562/j. chinasae. qcgc. 2023.03.016.
- [3] 张源,王禹臣.某轻型卡车风阻优化及试验验证[J].装备制造技术,2023(3):118-121,129.DOI:10.3969/j.issn. 1672-545X.2023.03.029.
- [4] BEIGMORADI S, VAHDATI M. Optimal configuration of a hatchback rear end considering drag and stability objectives[J]. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, 2019, 41: 334. DOI: 10. 1007/ s40430-09-1837-01.
- [5] KAJIWARA S. Passive variable rear-wing aerodynamics of an open-wheel racing car[J]. Automotive and Engine Technology, 2017, 2:107-117. DOI:10.1007/s41104-017-0021-9.
- [6] 许建民,范健明. 厢式半挂汽车列车附加减阻装置的减阻效果及机理分析[J]. 公路交通科技,2019,36(12):134-144. DOI:10.3969/j. issn. 1002-0268. 2019. 12.017.
- [7] 赖晨光,斯洋,陈祎,等.一种新型车用导流器的研究及其气动性能优化[J]. 汽车工程,2020,42(5):600-607. DOI: 10.19562/j. chinasae. qcgc. 2020.05.006.
- [8] 王庆洋,黄文鹏,赖晨光,等.基于气动附件的重型货车空气动力学减阻研究[J].汽车工程,2020,42(6):746-752. DOI:10.19562/j.chinasae.qcgc.2020.06.006.
- [9] 张英朝,李昀航,郭子瑜,等.长头重型卡车气动减阻优化[J].吉林大学学报(工学版),2022,52(4):745-753.DOI: 10.13229/j.cnki.jdxbgxb20200931.
- [10] 许建民,莫靖宇,龚晓岩,等. 侧风环境下减阻装置对重型货车气动特性的影响[J]. 公路交通科技,2022,39(1): 136-145. DOI:10.3969/j. issn. 1002-0268.2022.02.018.
- [11] 庄超,王欢,王晓宇,等.平头卡车气动减阻设计及试验研究[J]. 湖南大学学报(自然科学版),2023,50(6):45-52. DOI:10.16339/j.cnki.hdxbzkb.2023168.
- [12] 杨小龙,龚繁,龚政,等. 基于非稳态模拟的 SAE 车模气动减阻降噪研究[J]. 湖南大学学报(自然科学版),2023, 50(2):198-208. DOI:10.16339/j. cnki. hdxbzkb. 2022208.
- [13] 曹茂波.基于市场分析的我国客车行业发展趋势预测[J].全国流通经济,2022(13):125-128. DOI:10.16834/j. cnki.issn1009-5292.2022.13.015.
- [14] 彭倩,胡汉桥,黄红武,等.前围造型对大客车气动特性影响研究[J].重庆交通大学学报(自然科学版),2016,35 (6):158-162,176.DOI:10.3969/j.issn.1674-0696.2016.06.32.
- [15] 方忠,吴长风,于霖冲,等.前围造型对 12 m 客车空气动力学性能影响研究[J]. 客车技术与研究,2018,40(2):48-53. DOI:10.15917/j. cnki. 1006-3331.2018.02.002.
- [16] 陆润明,廖抒华,覃紫莹,等.尾部空气动力附加装置对客车气动阻力的影响[J].广西科技大学学报,2019,30(4): 5-8,13. DOI:10.16375/j. cnki. cn45-1395/t. 2019.04.008.
- [17] 许建民,赵军.基于 CFD 的客车空气动力学分析[J].集美大学学报(自然科学版),2012,17(3):195-199. DOI:10. 19715/j.jmuzr.2012.03.007.
- [18] 胡兴军,王靖宇,杨博.汽车空气动力学[M].北京:人民交通出版社,2022.

(责任编辑: 钱筠 英文审校: 吴跃勤)

DOI:10.11830/ISSN.1000-5013.202403035



概率预测强化学习下非结构环境 机械臂变阻抗力跟踪控制

董梓呈1,胡伟石2,邵辉1,郭霖1

(1. 华侨大学 信息科学与工程学院,福建 厦门 361021;
 2. 华侨大学 实验室与设备管理处,福建 厦门 361021)

摘要: 针对非结构环境下末端实时移动机械臂阻抗控制力跟踪问题,通过动态调节阻尼系数以应对接触环境的不确定性。为确保阻抗策略的高效搜索,利用机械臂与接触环境交互产生状态-动作序列构建概率预测模型(PPM)。学习过程中,机械臂仅需与非结构接触环境进行少量交互即可获得最优变阻抗策略,这使得该过程在真实机械臂上直接训练成为可能。仿真实验表明,在几种非结构环境下,所提出的方法使力跟踪动态和稳态性能均明显优于传统阻抗控制和自适应变阻抗控制。

Probability Prediction Reinforcement Learning for Variable Impedance Force Tracking Control of Robotic Arms in Unstructured Environments

DONG Zicheng¹, HU Weishi², SHAO Hui¹, GUO Lin¹

(1. College of Information Science and Engneering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China;

2. Department of Laboratory and Device Management, Huaqiao University, Xiamen 361021, China)

Abstract: Aiming at the real-time impedance control force tracking problems of the end mobile robotic arm in a unstructured environment, the damping coefficient is dynamically adjusted to cope with the uncertainty of the contact environment. To ensure efficient search of the impedance strategy, a probabilistic prediction model (PPM) is constructed by utilizing the interaction between the robotic arm and the contact environment to generate state-action sequences. During the learning process, the robotic arm only needs to interact minimally with the unstructured contact environment to obtain the optimal variable impedance strategy. This makes it possible to directly train the process on a real robotic arm. Simulation results show that in several unstructured environments, the proposed method significantly outperforms the traditional impedance control and adaptive variable impedance control in both dynamic and steady-state force tracking performance.

Keywords: variable impedance control; robotic arm force tracking; reinforcement learning; unstructured environment; probability prediction model

收稿日期: 2024-03-23

基金项目: 福建省自然科学基金资助项目(2021J01291);华侨大学研究生教育教学改革研究项目(22YJG006)

通信作者: 邵辉(1973-),女,副教授,博士,主要从事机器人运动规划与控制的研究。E-mail:shaohuihu11@163. com。

机械臂已经被广泛应用于各类接触式任务,如人机协作^[1]、货物装卸^[2]、外科手术^[3]等。这些场景中,除了高精度的运动控制外,还需考虑末端接触力的跟踪控制,以保证机械臂作业效果和交互安全性。 阻抗控制是一种机械臂力控制的经典方法,然而,实际中的接触环境往往是动态且未知的,经典阻抗控 制缺乏适应环境变化的能力,因此,难以实现精确力控制。

一些国内外学者研究了非结构环境下的阻抗控制力跟踪方法,目前主要方法可归结为参考轨迹自 适应和变阻抗控制两类。参考轨迹自适应通过辨识环境信息或直接根据接触力来预测机器人的参考轨 迹。Li 等^[4]用李雅普诺夫理论对接触动力学进行分析,提出一种迭代学习控制器,调节参考轨迹使接 触力保持在所需范围,控制性能优于传统阻抗控制,但所需迭代次数较多。刘胜遂等[5]提出基于卡尔曼 滤波的自适应阻抗控制方法,对机械臂接触环境的位置和刚度进行估计,但仍存在一定力跟踪误差。李 振等!『 在基于环境参数估计自适应生成参考轨迹的方法上,采用遗传算法补偿接触力误差,提高了接触 力跟踪精度。Roveda等¹⁷关注阻抗控制接触力过冲的问题,采用扩展卡尔曼滤波对环境刚度进行连续 自适应估计,避免接触过程的力超调和不稳定,但该方法的响应速度较慢且跟踪精度有限。此类方法依 赖于环境信息的辨识精度,对辨识误差力控精度有较大影响。变阻抗控制是一种更简单有效的自适应 力控制方法,对环境特性的估计误差不敏感,关键在于设计控制性能良好而通用的变阻抗策略以应对复 杂的接触环境。Jung 等^[8]和 Duan 等^[9]提出的自适应变阻抗控制算法具有等价的形式,根据机械臂末 端接触力实时调节阻尼系数,能够在未知刚度和几何形状的曲面上实现力跟踪,但该方法的跟踪精度受 限于采样频率和初始阻抗参数,在控制器和力传感器的采样频率足够高时,才能获得较好的控制效果。 Cao 等^[10] 对该自适应变阻抗方法进行改进,提出一种自适应更新率策略,但力控精度提升有限。 Hamedani 等^[11]提出了基于小波神经网络的智能变阻抗算法来自动调节阻尼系数,但这种方法在斜面 和复杂曲面上的力跟踪精度不高,且动态性能不佳。此类变阻抗方法难以较好地平衡力跟踪动态性能 和稳态误差,综合控制性能仍存在提升空间。

人工智能的快速发展为机械臂控制问题提供了新思路,例如,利用强化学习,机械臂能够通过试错 的方式优化自身行为,而不需要本体和环境的先验信息^[12-13]。Buchli 等^[14]提出一种基于策略函数的强 化学习算法 PI²,将此方法运用于机器人的自适应阻抗控制中,并证明其最优性。Li 等^[15]提出一种强化 学习变阻抗方法,通过仿真和实验证明机器人与环境只需少量交互即可成功学习出力控制策略。Wu 等^[16]研究了人机协作最优阻抗问题,用 Q-Learning 设计自适应阻抗控制律,使机器人能够根据接触力 在线估测人的示教轨迹,实现人机平顺交互。Du 等^[17]将虚拟阻尼项引入传统阻抗控制中,使用模糊强 化学习对虚拟阻尼进行调整,提升了手术机器人的力跟踪性能,并保证能量消耗最优。

然而,目前大多数基于强化学习的变阻抗方法主要关注任务本身而忽略了数据效率,机械臂需与环 境进行大量交互以采集足量的训练样本,这在实际机械臂系统中存在安全问题,且交互过程通常非常耗 时,因此,数据效率低下成为严重限制强化学习在实际机器人系统中应用的主要原因之一^[18-20]。基于 此,本文提出一种概率预测强化学习下非结构环境机械臂变阻抗力跟踪控制(PPM-VIC)方法。

1 问题描述

笛卡尔空间中,阻抗控制利用质量-弹簧-阻尼模型维持机械臂运动状态与外力之间的动态关系,使机械臂末端呈现期望的柔顺性。基于位置的阻抗控制,如图1所示。图1中:F_d,F_e分别表示期望力和

实际接触力, F_{d} , $F_{e} \in \mathbb{R}^{k}$,k为受力数; X_{r} , X_{d} 分别表示参考轨迹和期望轨迹, X_{r} , $X_{d} \in \mathbb{R}^{n}$, 在位置控制精度足够高的情况下可近似认为 机械臂末端实际轨迹与期望轨迹相等,即X = X_{d} 。阻抗模型将力跟踪误差转化为运动补偿 量,与参考轨迹叠加后得到期望轨迹,机械臂 末端跟踪期望轨迹可实现力跟踪。

对于n自由度的机械臂系统,阻抗控制的



图 1 基于位置的阻抗控制 Fig. 1 Position based impedance control

一般形式可表示为

$$\boldsymbol{M}(\ddot{\boldsymbol{X}}_{r}-\ddot{\boldsymbol{X}}_{d})+\boldsymbol{B}(\dot{\boldsymbol{X}}_{r}-\dot{\boldsymbol{X}}_{d})+\boldsymbol{K}(\boldsymbol{X}_{r}-\boldsymbol{X}_{d})=\boldsymbol{F}_{d}-\boldsymbol{F}_{eo}$$
(1)

式(1)中:M, B, K分别为质量、阻尼和刚度矩阵,它们直接决定了阻抗模型的动力学特性, $M, B, K \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 。

纯刚性接触环境 F。定义为

$$\boldsymbol{F}_{e} = \begin{cases} \boldsymbol{K}_{e}(\boldsymbol{X}_{e} - \boldsymbol{X}), & \boldsymbol{X}_{e} \geqslant \boldsymbol{X}, \\ \boldsymbol{0}, & \boldsymbol{X}_{e} < \boldsymbol{X}_{o} \end{cases}$$
(2)

式(2)中: K_e 为环境刚度, $K_e \in \mathbb{R}^{k \times n}$; X_e 为环境位置, $X_e \in \mathbb{R}^n$; $X_e \gg X$ 为机器人末端处于接触状态。

为简化分析,假设阻抗模型在笛卡尔空间各方向上是解耦的,以一维力跟踪为例,设 f_e, f_d, m, b, k , k_e, x_e 分别表示 $F_e, F_d, M, B, K, K_e, X_e$ 中的元素。

根据文献[9,11]的分析,若环境刚度未知或时变,可设力控方向的刚度为零,以实现力跟踪无偏差, 故设 $k \equiv 0$ 。非结构环境中,环境位置 x_e 通常难以精确获取,因此,可用常值估计量 \hat{x}_e 代替,假设估计误 差 $\delta x_e = \hat{x}_e - x_e$ 。令 $e = x_e - x_d = x_e - x$,则 $\hat{e} = e + \delta x_e$,用 \hat{e} 代替式(1)中的偏差项 e,有

 $\Delta f = f_{e} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}).$ (3) $nddef = f_{d} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}).$ (3) $nddef = f_{d} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}).$ (3) $nddef = f_{d} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}).$ (3) $ddef = f_{d} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}).$ (3) $ddef = f_{d} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}).$ (3) $ddef = f_{d} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}).$ (3) $ddef = f_{d} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}).$ (3) $ddef = f_{d} - f_{e} = m\hat{e} + b\hat{e} = m(\ddot{e} + \delta\ddot{x}_{e}) + b(\dot{e} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \ddot{x} + \delta\dot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) + b(\dot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x}_{e}) = m(\ddot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x} + \delta\dot{x} + \delta\dot{x} + \delta\dot{x} = m(\ddot{x}_{e} - \dot{x} + \delta\dot{x} + \delta\dot{x} + \delta\dot{x} + \delta\dot{x} + \delta\dot{x} + \delta\dot{x} = m(\ddot{x} + \delta\dot{x} = m(\ddot{x}$

2 强化学习变阻抗策略

最优变阻抗策略 $\pi^*(s_t)$ 在任意时刻状态 s_t 满足跟踪误差 $\Delta f_e = 0$ 。无模型强化学习(如深度确定 性策略梯度算法(DDPG)、近端策略优化算法(PPO)等)通常要求智能体与环境进行大量交互以收集足 够的训练样本,但过多的交互可能会对环境和机器人造成潜在的损伤,在实际机器人应用中并不可取。 强化学习可根据交互数据建立接触状态转移模型 $p(s_{t+1}|s_t)$,从而显著提高数据利用效率。

为消除未知动态环境引起的力跟踪误差,引入高斯过程建立接触状态转移概率模型,借助该模型近 似预测未来一段时间内的状态分布,并采用价值函数 V^π(s)进行评估,最后使用 BFGS(broyden-fletcher-goldfarb-shanno)算法更新参数,以逐步逼近最优变阻抗策略。

2.1 策略学习框架

考虑机械臂移动方向和受力方向,设连续状态 $s = [p_y, p_z, f_z, \Delta f_z]^T$,其中, p_y, p_z 分别表示世界坐标系下机械臂末端位置在 y 和 z 方向的对应分量, f_z 为力控方向上的实际接触力, Δf_z 为力跟踪误差, 自适应调整量 u 为力控方向的阻尼系数。定义自适应阻抗策略 $\pi(s_i, \theta), \theta$ 为待学习的策略参数。自适应阻抗策略由两部分构成。

1) 径向基(RBF)神经网络,将状态映射到初始控制量 $u' = \pi'(s)$ 。

2) 饱和函数表达式为 u=Sat(u'),将控制量限制在合理范围内。

RBF 神经网络等价于 N 个高斯核的线性组合,即

$$\pi'(\mathbf{s}_t) = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\beta}_i k_{\pi}(\mathbf{c}_i, \mathbf{s}_t) = \boldsymbol{\beta}_{\pi}^{\mathrm{T}} k_{\pi}(\mathbf{C}_{\pi}, \mathbf{s}_t) ; \qquad (4)$$

$$k_{\pi}(\boldsymbol{c}_{i},\boldsymbol{s}_{t}) = \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{c}_{i}-\boldsymbol{s}_{t})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}_{\pi}^{-1}(\boldsymbol{c}_{i}-\boldsymbol{s}_{t})\right).$$
(5)

式(4),(5)中: $\beta_{\pi} = (K_{\pi} + \sigma_{\pi}^2 I)^{-1} y_{\pi}$ 表示加权向量, K_{π} 是由元素 $k_{\pi}(c_i, c_j), i, j = 1, 2, \dots, N$ 构成的Gram 矩阵,I为单位矩阵, y_{π} 为训练目标, $y_{\pi} = \pi'(C_{\pi}) + \eta_{\pi}, \eta_{\pi} \sim N(0, \sigma_{\pi}^2 I)$ 表示测量噪声, σ_{π}^2 代表噪声方差; Λ_{π} 为加权欧式权重矩阵; C_{π} 表示核函数的中心点, $C_{\pi} = [c_1, c_2, \dots, c_N]^{T}$ 。

令 $g(u') = [9\sin(u') + \sin(3u')]/8 \in [-1,1]$,饱和函数 Sat(u')把控制量限制在 u_{max} 与 u_{min} 之间, 其表达式为

$$\operatorname{Sat}(u') = \frac{1}{2} (u_{\max} - u_{\min}) g(u') + \frac{1}{2} (u_{\max} + u_{\min}) \,.$$
(6)

代价函数设计为有界的形式,设目标状态 $s_{tar} = [0,0,f_d,0]^T$, Λ_L 为对角权重矩阵,与位置相关的元素为零,常数 λ 用于控制代价函数达到饱和时的状态偏差度。

代价函数 $L(s_t) \in [0,1]$ 为

$$L(\mathbf{s}_{t}) = 1 - \exp\left(-\frac{1}{2\lambda^{2}}(\mathbf{s}_{t} - \mathbf{s}_{tar})^{\mathrm{T}} \mathbf{\Lambda}_{\mathrm{L}}(\mathbf{s}_{t} - \mathbf{s}_{tar})\right)_{\circ}$$
(7)

2.2 接触状态概率预测模型

假设连续状态 $s \in \mathbb{R}^{\varepsilon}$ 、连续控制量 $u \in \mathbb{R}^{1}$ 及随机噪声 ω 均服从高斯分布,则预测模型为高斯过程, 即 $h \sim GP(m(\cdot), k(\cdot, \cdot))$ 。接触状态概率预测模型表达式为

$$\mathbf{s}_t = h(\mathbf{s}_{t-1}, \boldsymbol{u}_{t-1}, \boldsymbol{\omega})_{\circ}$$
(8)

机械臂在特定变阻抗策略作用下沿接触环境表面的运动过程中,以固定频率对数据采样,构成预测 模型的训练输入 $X = [\tilde{s}_1, \tilde{s}_2, \dots, \tilde{s}_n]^T$ 及训练目标 $Y = [\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_n]^T$,其中, $\tilde{s}_t = (s_t, u_t) \in \mathbb{R}^{E+1}$ 表示状态-动作二元组, $\Delta_t = s_{t+1} - s_t \in \mathbb{R}^E$ 为相邻时刻的状态变化量。

协方差函数 k(•,•)与式(5)有相似的形式,即

$$k(\tilde{\boldsymbol{s}}, \tilde{\boldsymbol{s}}') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{1}{2}(\tilde{\boldsymbol{s}} - \tilde{\boldsymbol{s}}')^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda}^{-1}(\tilde{\boldsymbol{s}} - \tilde{\boldsymbol{s}}')\right) + \delta\sigma_{\omega}^2 \,. \tag{9}$$

式(9)中: $\delta \alpha s = s'$ 相等时为1,否则为0; $\Lambda = \text{diag}(l_1^2, l_2^2, \dots, l_E^2)$ 是由尺度 l组成的权重矩阵,与信号方差 σ_f^2 ,噪声方差 σ_a^2 共同构成预测模型的超参数(利用第二类最大似然估计^[19]获取)。

每个独立的预测模型分别对应每一维状态分量。由于高斯分布经非线性映射通常会变成非高斯分 布,对于任一输入 $\tilde{s}_{t-1} \sim N(\mu_{\tilde{s}_{t-1}}, \Sigma_{\tilde{s}_{t-1}}) \in \mathbb{R}^{E+1}$,利用矩匹配法近似预测输出 $\Delta_t \sim N(\mu_{\Delta_t}, \Sigma_{\Delta_t}) \in \mathbb{R}^{E}$,故预 测均值为

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_{1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_{1}, \cdots, \boldsymbol{\beta}_{E}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_{E} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \,. \tag{10}$$

式(10)中: $\boldsymbol{\beta}_a = (\boldsymbol{K}_a + \sigma_{\boldsymbol{\omega}_a}^2 \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{y}_a, a \in [1, 2, \dots, E], \boldsymbol{K}_a, \sigma_{\boldsymbol{\omega}_a}, \boldsymbol{y}_a \, \mathcal{G}$ 别表示第 *a* 个预测模型的 Gram 矩阵、噪 声方差及训练目标;向量 $\boldsymbol{q}_a = [q_{a_1}, q_{a_2}, \dots, q_{a_a}]^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^n$,

$$q_{a_i} = \frac{\sigma_{f_a}^2 \exp(-\frac{1}{2} (\tilde{\boldsymbol{s}}_i - \boldsymbol{\mu}_{\tilde{\boldsymbol{s}}_{i-1}})^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\boldsymbol{s}}_{i-1}} + \boldsymbol{\Lambda}_a)^{-1} (\tilde{\boldsymbol{s}}_i - \boldsymbol{\mu}_{\tilde{\boldsymbol{s}}_{i-1}}))}{\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\boldsymbol{s}}_{i-1}} \boldsymbol{\Lambda}_a^{-1} + \boldsymbol{I}|}} \,. \tag{11}$$

式(11)中: σ_{f_a} , Λ_a 分别为对应预测模型的信号方差和权重矩阵。

预测协方差(Σ_Δ)为

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\Lambda}_{t}} = \begin{bmatrix} \operatorname{var}[h_{1}(\widetilde{\boldsymbol{s}}_{t-1})] & \cdots & \operatorname{cov}[h_{1}(\widetilde{\boldsymbol{s}}_{t-1}), h_{E}(\widetilde{\boldsymbol{s}}_{t-1})] \\ \vdots & \vdots \\ \operatorname{cov}[h_{E}(\widetilde{\boldsymbol{s}}_{t-1}), h_{1}(\widetilde{\boldsymbol{s}}_{t-1})] & \cdots & \operatorname{var}[h_{E}(\widetilde{\boldsymbol{s}}_{t-1})] \end{bmatrix}.$$
(12)

式(12)中:对角线元素 var[$h_a(\tilde{s}_{t-1})$]为第 a 个预测模型对 \tilde{s}_t 的预测方差,非对角线元素 cov[$h_a(\tilde{s}_{t-1})$, $h_b(\tilde{s}_{t-1})$], $b \in [1,2,\dots,E]$ 为不同预测模型对同一输入 \tilde{s}_t 的预测混合协方差。

预测协方差各元素为

$$\sigma_{f_a}^{2} - \operatorname{tr}\left[\left(\mathbf{K}_{a} + \sigma_{a_a}^{2}\mathbf{I}\right)^{-1}\mathbf{Q}\right] + \boldsymbol{\beta}_{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\beta}_{a} - \left(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}}^{a}\right)^{2}, \quad a = b, \\ \boldsymbol{\beta}_{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\beta}_{b} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}}^{a}\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}}^{b}, \quad a \neq b_{\circ}$$

$$(13)$$

令 $P = \Sigma_{\widetilde{s}_{t-1}}(\Lambda_a^{-1} + \Lambda_b^{-1}) + I, \rho_i = \widetilde{s}_i - \mu_{\widetilde{s}_{t-1}}, \rho_j = \widetilde{s}_j - \mu_{\widetilde{s}_{t-1}}, z_{i,j} = \Lambda_a^{-1}\rho_i + \Lambda_b^{-1}\rho_j, i, j \in [1, 2, \dots, n].$ 矩阵 $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的元素为

$$Q_{i,j} = \frac{\sigma_{f_a} \sigma_{f_b}}{\sqrt{|\mathbf{P}|} \exp\left\{\frac{1}{2} [\mathbf{\rho}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{\Lambda}_a^{-1} \mathbf{\rho}_i + \mathbf{\rho}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{\Lambda}_b^{-1} \mathbf{\rho}_j - \mathbf{z}_{i,j}^{\mathrm{T}} \mathbf{P}^{-1} \mathbf{\Sigma} \mathbf{z}_{i,j}]\right\}}$$
(14)

2.3 状态预测及策略评估

相邻时刻的状态概率分布为

$$p(\mathbf{s}_{t-1}) \xrightarrow{\text{RBF}} p(u'_{t-1}) \rightarrow p(u_{t-1}) \rightarrow p(\widetilde{\mathbf{s}}'_{t-1}) \rightarrow p(\widetilde{\mathbf{s}}_{t-1}) \xrightarrow{\text{GP}} p(\mathbf{\Delta}_t) \rightarrow p(\mathbf{s}_t) \,. \tag{15}$$

假设前一时刻的状态概率分布 $p(s_{t-1})$ 已知,可得出初始控制量概率分布 $p(u'_{t-1})$,其均值和协方 差分别为

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{u}'_{t-1}} = \boldsymbol{\beta}_{\pi}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_{\pi},$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{u}'_{t-1}} = \boldsymbol{\beta}_{\pi}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q}_{\pi} \boldsymbol{\beta}_{\pi} - (\boldsymbol{\beta}_{\pi}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_{\pi})^{2} \circ$$

$$(16)$$

根据正弦函数期望和方差的性质,容易计算限幅后的控制量概率分布 $p(u_{t-1})$,继而初始联合概率 分布 $p(s_{t-1}, u'_{t-1}) = p(\tilde{s}'_{t-1}), p(\tilde{s}'_{t-1})$ 计算式为

$$p(\tilde{\boldsymbol{s}}'_{t-1}) = N\left[\begin{bmatrix}\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{s}_{t-1}}\\ \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{u}'_{t-1}}\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t-1}} & \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t-1},\boldsymbol{u}'_{t-1}}\\ \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t-1},\boldsymbol{u}'_{t-1}}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{u}'_{t-1}}\end{bmatrix}\right].$$
(17)

非对角线元素($\Sigma_{s_{t-1},u_{t-1}}$)的计算式为

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t-1},\boldsymbol{u}_{t-1}'} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\beta}_{\pi_i} \boldsymbol{q}_{\pi_i} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t-1}} \, \left(\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t-1}} + \boldsymbol{\Lambda}_{\pi} \right)^{-1} \left(\boldsymbol{s}_i - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{s}_{t-1}} \right) \,. \tag{18}$$

利用正弦函数期望和方差的性质,可以得到联合概率分布 $p(s_{t-1})$,根据当前预测模型及矩匹配法,可预测状态变化量的概率分布 $p(\Delta_t)$,考虑到 $\Delta_t = f(s_{t-1}, u_{t-1}, \omega) - s_{t-1}, p(s_t)$ 计算式为

$$p(\mathbf{s}_{t}) = \begin{cases} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{s}_{t}} = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{s}_{t-1}} + \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\Delta}_{t-1}}, \\ \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{s}_{t}} = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{s}_{t-1}} + \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{s}_{t-1} \cdot \boldsymbol{\Delta}_{t}} + \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{s}_{t-1} \cdot \boldsymbol{\Delta}_{t}} + \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}} \,. \end{cases}$$
(19)

式(19)中: $\mu_{s_{t-1}}$ 和 $\Sigma_{s_{t-1}}$ 分别为上一时刻的状态分布; $\mu_{A_{t-1}}$ 和 Σ_{A_t} 分别为状态变化量的预测分布; Σ_{s_{t-1},A_t} 分别为交叉协方差项。

重复式(15),得到虚拟状态序列[s_0, s_1, \dots, s_H],以此实现策略评估,序列的价值函数($V^{\pi}(s_0)$)为

$$V^{\pi}(\mathbf{s}_{0}) = \sum_{t=0}^{H} E[L(\mathbf{s}_{t})] = \sum_{t=0}^{H} \int L(\mathbf{s}_{t}) p(\mathbf{s}_{t}) d\mathbf{s}_{t} \,. \tag{20}$$

2.4 策略参数更新

待学习的策略参数
$$\boldsymbol{\theta} = [\boldsymbol{C}_{\pi}, \boldsymbol{y}_{\pi}, \boldsymbol{\Lambda}_{\pi}, \sigma_{\pi}^{2}]$$
。最优变阻抗策略为
 $\pi^{*}(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{\theta}^{*}) = \arg\min V^{\pi}(\boldsymbol{s}_{0})$ 。 (21)

为保证价值函数最小,需计算策略参数的梯度,即

$$\frac{\mathrm{d}V^{\pi}(\boldsymbol{s}_{0})}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} = \sum_{t=1}^{H} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} E[L(\boldsymbol{s}_{t})]_{\circ}$$
(22)

代价函数 $L(s_t)$ 依赖状态概率分布 $p(s_t) \sim N(\mu_{s_t}, \Sigma_{s_t})$,利用链式法则,有

$$\frac{\mathrm{d}E[L(\boldsymbol{s}_{t})]}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial E[L(\boldsymbol{s}_{t})]}{\partial \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{s}_{t}}} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{s}_{t}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial E[L(\boldsymbol{s}_{t})]}{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t}}} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}}.$$
(23)

令 $\Psi = \Lambda_{L} (I + \Sigma_{s_{t}} \Lambda_{L})^{-1},$ 由式(7), 期望 $E[L(s_{t})]$ 为

$$E[L(\boldsymbol{s}_{t})] = \int L(\boldsymbol{s}_{t}) p(\boldsymbol{s}_{t}) d\boldsymbol{s}_{t} = 1 - \frac{\exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{s}_{t}} - \boldsymbol{s}_{tar})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{s}_{t}} - \boldsymbol{s}_{tar})\right]}{\sqrt{|\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{s}_{t}}\boldsymbol{\Lambda}_{\mathrm{L}}|}}$$
(24)

则偏导数为

$$\frac{\partial E[L(\boldsymbol{s}_{t})]}{\partial \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{s}_{t}}} = -E[L(\boldsymbol{s}_{t})](\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{s}_{t}} - \boldsymbol{s}_{\text{tar}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}, \qquad (25)$$

$$\frac{\partial E[L(\mathbf{s}_{t})]}{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{s}_{t}}} = \frac{1}{2} E[L(\mathbf{s}_{t})] [\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{s}_{t}} - \mathbf{s}_{\text{tar}})(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{s}_{t}} - \mathbf{s}_{\text{tar}})^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{I}] \boldsymbol{\Psi}_{\circ}$$
(26)

当前时刻的状态概率分布 $p(s_t)$ 由前一时刻的状态概率分布 $p(s_{t-1})$ 通过策略 $\pi(s_{t-1}, \theta)$ 及高斯过 程模型 $h(\cdot)$ 预测得到。因此,再次利用链式法则,有

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_{s_{t}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial\boldsymbol{\mu}_{s_{t}}}{\partial\boldsymbol{\mu}_{s_{-1}}} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_{s_{t-1}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial\boldsymbol{\mu}_{s_{t}}}{\partial\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t-1}}} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t-1}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial\boldsymbol{\mu}_{s_{t}}}{\partial\boldsymbol{\theta}},$$
(27)

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t}}}{\partial\boldsymbol{\mu}_{s_{t-1}}} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_{s_{t-1}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t}}}{\partial\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t-1}}} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t-1}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t}}}{\partial\boldsymbol{\theta}} \,. \tag{28}$$

显然,这是一个迭代计算的过程, $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_{s_{t-1}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}}$ 和 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Sigma}_{s_{t-1}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}}$ 由前次计算中得出,利用链式法则,有

$$\frac{\partial \boldsymbol{\mu}_{s_{t}}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}}}{\partial \boldsymbol{\mu}_{u_{t-1}}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\mu}_{u_{t-1}}}{\partial \boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}}}{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{u_{t-1}}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{u_{t-1}}}{\partial \boldsymbol{\theta}}, \qquad (29)$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{s_{t}}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}}}{\partial \boldsymbol{\mu}_{u_{t-1}}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\mu}_{u_{t-1}}}{\partial \boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\Delta}_{t}}}{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{u_{t-1}}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}_{u_{t-1}}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \,. \tag{30}$$

由价值函数算出策略参数的梯度,使用 BFGS 算法更新策略参数,当 V^{**}(s₀)趋于零时,训练收敛。

3 仿真验证及分析

仿真实验基于 MATLAB/Simulink 设计,用 Robotic Toolbox 搭建 PUMA560 机械臂模型,期望充 分体现机械臂动力学特性。PUMA560 型机械臂可视化模型,如图 2 所示。轨迹生成和接触环境模型 通过 S-Function 实现,机械臂位置内环可达较高控制精度,满足验证要求。仿真和策略训练过程在搭 载 Core i7-10700 型工作站中完成,无 GPU 加速。

3.1 训练设置

策略网络模型,如图 3 所示。输入层由当前状态 s_t 构成,隐藏层神经元个数 N 根据实际情况而定, 其中的高斯核函数对输入信息进行空间映射变换,输出层对隐藏层神经元的信息进行线性加权求和,得 到初始控制量 u'_t ,经连续可微的饱和函数 Sat 限幅到合理的范围内,得到最终控制量 u_t 。训练时基于 BFGS(broyden-fletcher-goldfarb-shanno)算法更新策略。



图 2 PUMA560 型机械臂可视化模型





假设接触环境刚度 $k_e = 5\ 000\ \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$,环境为余弦 N,在机械臂运动过程中,保持末端姿态不变。选择合 适的质量系数 $m = 0.2\ \text{kg}$ 和刚度系数 $k = 0\ \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$,阻 尼系数由策略网络动态调整。机械臂末端在 y 方向上 运动速度为 0.16 m $\cdot \text{s}^{-1}$,x 方向位置保持不变,机械臂 从接触面的起点运动至终点需 6 s。

为减少训练时间,将 Simulink 仿真步长固定为 0.005 s,决策频率为 0.05 s,采样频率 0.05 s,阻尼为 0.01~150.00,预测时间域为 120,隐藏层神经元数 N 为 200,代价函数饱和系数 λ 为 5。

在每一次训练迭代中,机械臂在当前阻抗策略(第1 次迭代使用随机策略)的作用下从接触面的起点运动到

终点,同时,以特定频率状态和控制量进行采样。完成一次交互后,采样的数据用于估计高斯过程预测 模型的超参数。机械臂根据当前策略与该预测模型进行虚拟交互,产生虚拟状态-动作序列,并以此虚 拟数据计算价值函数。最后,计算价值函数的梯度,更新策略的参数。随着迭代次数的增加,用于训练



 u_t^*

Sat

N

图 3 策略网络模型 Fig. 3 Policy network model

假设接触环境刚度 $k_e = 5\ 000\ \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$,环境为余弦曲面(图 4),力控方向(z 方向)的期望力 $f_a = 10$



预测模型的数据集不断扩充,模型趋于准确,预测不确定性趋于降低。

训练过程中的代价,如图 5 所示。图 5 中:L 为价值;蓝色曲线是机械臂与预测模型进行虚拟交互时的预测代价,其宽度表示预测过程的不确定性;红色曲线为机械臂与真实环境交互的实际代价,直接反应了力控制效果。

由图 5 可知:在训练初期,由于数据集较小,高斯过程模型的预测是不准确的,方差很大,随着迭代次数的增多,预测模型趋于准确,不确定性变得很小;最终,预测代价与实际代价都趋于零,机械臂获得最优变阻抗策略 $\pi^*(s, \theta^*)$ 。



图 5 训练过程中的代价



图 6 为训练结果。对比训练结果与传统阻抗控制、自适应变阻抗控制(初始阻尼系数设为 20 N·

m⁻¹,更新率为 0. 02)^[9]可知:参考轨迹不准确导致传统 阻抗控制在非结构环境中无法实现恒力跟踪,接触力稳 态误差随环境位置的变化而呈现周期性变化,最大稳态 跟踪误差为 1.6 N;相对而言,自适应变阻抗控制稳态 精度更高,但动态过程较差,其稳态跟踪误差与初始阻 尼系数、更新率及采样频率有关,更高精度的力跟踪参 数易导致更差的动态过程^[8],在此场景下最大稳态误差 约为 0.25 N。因此,提出的 PPM-VIC 方法具有很小的 超调和更高的稳态跟踪精度。





3.3 接触环境的对比测试

为了验证训练的变阻抗策略是否适用于其他类型

的接触环境,设计斜面环境恒力跟踪、复杂曲面环境恒力跟踪和复杂曲面环境变力跟踪 3 种非结构环境 任务场景,初始环境刚度均为 k_e=5 000 N·m⁻¹。对机械臂而言,环境信息未知。

设置机械臂的作业环境为斜率未知的斜面,则机械臂末端实时移动过程中 x_e为非零常值, x_e=0。 斜面环境恒力跟踪,如图 7 所示。 由图 7(b)可知:在斜面环境下,传统阻抗控制在刚度系数 k=0 时始终存在恒定的稳态误差;自适 应变阻抗控制在接触初期会产生较大的超调,需要约 0.7 s 才能使接触力稳定至期望值,动态性能较 差,但稳态时可实现高精度力跟踪;PPM-VIC 方法在刚发生接触时存在微小抖震,但超调量明显小于另 外两种控制方式,稳定后跟踪精度优于自适应变阻抗。接触环境刚度突变时,3 种控制方法都表现出不 同程度的超调和震荡,但 PPM-VIC 方法表现出更优的控制效果。



图 7 斜面环境恒力跟踪



斜面环境恒力跟踪性能对比,如表1所示。

对于未知表达式的复杂接触曲面,显然 $x_e, x_e, x_e \neq 0$ 且始终随着时间变化。设期望力 $f_d = 10 \text{ N}, 5$ 杂曲面环境恒力跟踪,如图 8 所示。

由图 8(b)可知:接触环境起伏对传统阻抗控制 的影响最大,跟踪误差与环境位置变化速度有关,2 s 后环境变化速度明显变大,力跟踪误差也随之增大。

自适应变阻抗控制的动态性能较差,但稳态误差优于传统阻抗控制。PPM-VIC 方法几乎不受环境位置 变化的影响,能够以较高的精度跟踪恒定期望力。



(a) 接触环境轨迹



图 8 复杂曲面环境恒力跟踪

Fig. 8 Constant force tracking on complex surface

复杂曲面环境恒力跟踪性能对比,如表2所示。复杂曲面环境变力跟踪性能对比,如表3所示。

表 2 复杂曲面环境恒力跟踪性能对比

Tab. 2 Comparison of constant force tracking performance on a complex surface environment

表 3	复杂曲面环境变力跟踪性能对比

Tab. 3 Comparison of variable force tracking

performance on complex surface environmer	nt
---	----

控制方法	超调量/%	调节时间/s	稳态误差/N
传统阻抗	37.2	0.15	≪1.02
自适应变阻抗	68.5	0.25	≪0.29
PPM-VIC	0.9	0.30	≪0.03

控制方法	超调量/%	调节时间/s	稳态误差/N
传统阻抗	38.0	0.15	≪0.880
自适应变阻抗	69.0	0.30	≪0.239
PPM-VIC	4.0	0.40	≪0.014

艮踪						
slope	surro	und	ing			

表 1 斜面环境恒力跟踪性能对比 Tab. 1 Comparison of constant force tracking

performance on slope environment

控制方法	超调量/%	调节时间/s	稳态误差/N
传统阻抗	8.0	0.15	0.170 00
自适应变阻抗	68.0	0.70	0.000 25
PPM-VIC	1.0	0.55	0.000 07





图 9 复杂曲面环境变力跟踪 Fig. 9 Variable force tracking on complex surface environment

由图 9 可知:前 1.5 s环境位置变化相对平缓,3 种控制方法均可在稳定后较好地跟踪期望力;自 2.5 s开始,接触环境变得陡峭,传统阻抗控制和自适应变阻抗都出现了不同程度的跟踪误差,但自适应 变阻抗误差较小,PPM-VIC 方法仍然能以较高精度跟踪连续变化的期望力。

4 结束语

针对非结构环境下机械臂难以实现良好的力跟踪性能,以及强化学习数据利用效率低的问题,将机 械臂力控制问题建模为马尔可夫决策过程,提出一种基于概率预测强化学习的 PPM-VIC 方法。利用 概率预测模型及矩匹配法预测未来时间域内的状态序列分布,从而产生大量虚拟训练样本,使机械臂仅 需与环境交互 18 次即可获得良好的变阻抗策略。仿真结果表明,提出的变阻抗策略适用于各种非结构 接触环境,其超调量、震荡幅度及稳态精度均显著优于传统阻抗控制和自适应变阻抗控制,在期望力恒 定和连续变化时均具备良好的跟踪性能。

参考文献:

- [1] PETERNEL L, TSAGARAKIS N, CALDWELL D, et al. Robot adaptation to human physical fatigue in human-robot co-manipulation[J]. Autonomous Robots, 2018, 42(5):1011-1021. DOI 10. 1007/s10514-017-9678.
- [2] 倪涛,黎锐,缪海峰,等.船载机械臂末端位置实时补偿[J].吉林大学学报(工学版),2020,50(6):2028-2035.DOI: 10.13229/j.cnki.jdxbgxb20190662.
- [3] REN Qinyuan, ZHU Wenxin, ZHAO Feng, *et al*. Learning-based force control of a surgical robot for tool-soft tissue interaction[J]. IEEE Robotics and Automation Letters, 2021, 6(4):6345-6352. DOI:10.1109/LRA. 2021.3093018.
- [4] LI Y, GOWRISHANKAR G, NATHANAEL J, *et al.* Force, impedance, and trajectory learning for contact tooling and haptic identification[J]. IEEE Transactions on Robotics, 2018, 34(5):1-13. DOI:10.1109/TRO.2018.2830405.
- [5] 刘胜遂,李利娜,熊晓燕,等.基于卡尔曼滤波的机器人自适应控制方法研究[J].机电工程,2023,40(6):936-944. DOI:10.3969/j.issn.1001-4551.2023.06.017.
- [6] 李振,赵欢,王辉,等.机器人磨抛加工接触稳态自适应力跟踪研究[J].机械工程学报,2022,58(9):200-209.DOI: 10.3901/JME.2022.09.200.
- [7] ROVEDA L, IANNACCI N, VICENTINI F, et al. Optimal impedance force-tracking control design with impact formulation for interaction tasks[J]. IEEE Robotics and Automation Letters, 2016, 1(1):130-136. DOI:10.1109/LRA. 2015.2508061.
- [8] JUNG S, HSIA T C, BONITZ R G. Force tracking impedance control of robot manipulators under unknown environment[J]. IEEE Transactions on Control Systems Technology, 2004, 12(3): 474-483. DOI: 10. 1109/TCST. 2004. 824320.
- [9] DUAN Jinjun, GAN Yajui, CHEN Ming, et al. Adaptive variable impedance control for dynamic contact force tracking in uncertain environment[J]. Robotics and Autonomous Systems, 2018, 102:54-65. DOI:10.1016/j. robot. 2018. 01.009.

- [10] CAO Hongli, CHEN Xiaoan, HE Ye, et al. Dynamic adaptive hybrid impedance control for dynamic contact force tracking in uncertain environments [J]. IEEE Access, 2019, 7: 83162-83174. DOI: 10. 1109/ACCESS. 2019. 2924696.
- [11] HAMEDANI M H,SADEGHIAN H,ZEKRI M,et al. Intelligent impedance control using wavelet neural network for dynamic contact force tracking in unknown varying environments[J]. Control Engineering Practice, 2021, 113: 104840. DOI:10.1016/J. CONENGPRAC. 2021.104840.
- [12] ANDRYCHOWICZ O M, BAKER B, CHOCIEJ M, et al. Learning dexterous in-hand manipulation[J]. The International Journal of Robotics Research, 2020, 39(1): 3-20. DOI: 10. 1177/0278364919887447.
- [13] LI Yunfei, KONG Tao, LI Lei, et al. Learning design and construction with varying-sized materials via prioritized memory resets[C]//International Conference on Robotics and Automation. Philadelphia: IEEE Press. 2022;7469-7476. DOI:10.1109/ICRA46639.2022.9811624.
- [14] BUCHLI J, STULP F, THEODOROU E, *et al.* Learning variable impedance control[J]. The International Journal of Robotics Research, 2011, 30(7): 820-833. DOI: 10. 1177/0278364911402527.
- [15] LI Chao, ZHANG Zhi, XIA Guihua, et al. Efficient force control learning system for industrial robots based on variable impedance control[J]. Sensors, 2018, 18(8): 2539. DOI: 10.3390/s18082539.
- [16] WU Min, HE Yanhao, LIU S. Adaptive impedance control based on reinforcement learning in a human-robot collaboration task with human reference estimation[J]. International Journal of Mechanics and Control, 2020, 21(1):21-32. DOI:10.1007/978-3-030-19648-6_12.
- [17] DU Zhijiang, WANG Wei, YAN Zhiyuan, et al. Variable admittance control based on fuzzy reinforcement learning for minimally invasive surgery manipulator[J]. Sensors, 2017, 17(4):844. DOI:10.3390/s17040844.
- [18] DEISENROTH M P, FOX D, RASMUSSEN C E. Gaussian processes for data-efficient learning in robotics and control[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2015, 37(2):408-423. DOI:10.1109/ TPAMI. 2013. 218.
- [19] RASMUSSEN C E, WILLIAMS C K I. Gaussian processes for machine learning[M]. Cambridge: MIT Press, 2005.
- [20] DEISENROTH M P. Efficient reinforcement learning using Gaussian process[D]. Karlsruhe:Karlsruhe Institute of Technology, 2010. DOI: 10. 5445/KSP/1000019799.

(责任编辑:陈志贤 英文审校:陈婧)

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202311024

机器人石材雕刻粗加工能耗 建模与优化分析



黄吉祥1, 尹方辰1, 黄身桂1, 张舜德2, 顾立志2

(1. 华侨大学 制造工程研究院, 福建 厦门 361021;2. 泉州信息工程学院 机械与电气工程学院, 福建 泉州 362000)

摘要: 以 ABB1200 型石雕机器人加工汉白玉为例,对石雕机器人加工能耗进行建模和分析,探究其功耗特 点。首先,基于田口法规划实验,采用 Minitab 非线性拟合建立磨削工艺参数与磨削比能的回归方程,构建以 磨削加工工艺参数为变量,以最小磨削比能为优化目标的优化模型。然后,使用模拟退火算法计算最小磨削 比能的工艺参数,通过实验数据和算法优化结果分析石雕机器人粗加工能耗特点。结果表明:去除同等体积 的材料,磨削比能最小目标下的最优磨削加工参数的能耗比经验参数节约了 38.4%。

关键词: 机器人石材雕刻;工艺参数;田口法;能量效率;模拟退火算法

中图分类号: TG 147; TG 17 文献标志码: A 文章编号: 1000-5013(2024)04-0471-07

Modeling and Optimization Analysis of Energy Consumption in Rough Machining of Robotic Stone Carving

HUANG Jixiang¹, YIN Fangchen¹, HUANG Shengui¹, ZHANG Shunde², GU Lizhi²

(1. Institute of Manufacturing Engineering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China;

2. School of Mechanical and Electronic Engineering, Quanzhou University of Information Engineering, Quanzhou 362000, China)

Abstract: Taking the machining processing of white marble using ABB1200 type stone carving robot as an example, the energy consumption characteristics were explored through modeling and analyzing of the energy consumption of stone carving robot processing. Firstly, based on the Taguchi method for planning experiments, using Minitab nonlinear fitting to establish a regression equation between grinding process parameters and grinding specific energy, an optimization model was constructed with grinding processing parameters as variables and the minimum grinding specific energy as the optimization objective. Then, the processing parameters of the lowest grinding specific energy was calculated using a simulated annealing algorithm, and the energy consumption characteristics of rough machining using stone carving robot were analyzed through experimental data and algorithm optimization results. The results show that to remove the same volume of materials, the energy consumption employing the optimal grinding parameters under the goal of minimizing grinding specific energy is reduced by 38.4% compared to that using the empirical parameters.

Keywords: robotic stone carving; processing parameters; Taguchi method; energy efficiency; simulated annealing algorithm

基金项目: 福建省科技计划项目(2022H6029, 2022H0018); 工业机器人与智能制造福建省高校工程研究中心开放 课题(GYJQ2002)

收稿日期: 2023-11-29

通信作者: 黄吉祥(1989-),男,实验师,主要从事高效精密加工的研究。E-mail:xmz024@hqu.edu.cn。

作为一种天然的原材料,石材具有抗腐蚀性能好、抗风化能力强、易于获得等优点。古时候的人们 就已经开始使用石材作为装饰品的原材料。石材发展历史源远流长,而石雕作为可以传承千年的文化 载体,是人们窥探历史过往和表达当下文化的重要媒介。长期以来,石材的加工和雕刻一直采用人工加 工的方法,工人们通过高超的手艺和创造力,对一块石材进行雕刻打磨,经过长时间的工作,最终完成一 项作品,与未加工之前的原材料相比,作品的艺术价值和商业价值都会发生质变,正因如此,石材雕刻吸 引越来越多的人员加入工业生产之中。目前,传统的石材雕刻行业面临着生成力低下、劳动力短缺、环 境污染严重等发展瓶颈^[1-2],而将工业机器人用于石材雕刻已被广泛认可^[3]。例如,福建省惠安县已有 企业采用规模化的石材雕刻机器人(简称石雕机器人)加工石雕工艺品。然而,由于目前机器人用于石 材雕刻的相关研究较少,行业内也没有成体系的加工工艺技术,从而导致加工过程存在低效率、高能耗 等问题。在当前严格控制能耗、减少碳排放的大背景下,提高石材雕刻过程的能量效率,减少能耗具有 重要意义。

在机床加工领域,加工能耗建模优化问题已有非常广泛的研究^[4-8]。文献[9]对机器人抛光系统进 行能耗研究,构建一种综合机器人运动规划和任务调度的优化模型,并通过自适应优化算法对模型进行 求解,通过优化可以降低 18%以上的能耗。文献[10]基于 BN-LSTM 构建机器人抛光系统的能耗模 型,并在安川机器人抛光系统中进行实验验证。文献[11]研究铣削机器人系统的能量特性,通过特定应 用下的加工实验,定性地给出加工参数对铣削加工机器人能耗的影响分析。目前,还没有关于机器人石 材加工能耗优化分析方面的研究。基于此,本文就机器人石材雕刻过程中能耗最大的粗加工过程进行 能耗建模与优化分析。

1 机器人石材雕刻能耗分析

1.1 石雕机器人加工工艺过程

石材雕刻机器人(图 1)的主体为 ABB1200 型工业机器人。ABB1200 型工业机器人广泛应用于电

子、机械加工等场景,且可以和外部系统进行广泛的沟通。该工业机器人集成旋转工作台、电主轴、对刀仪和水冷等部件可构成石雕机器人,通过更换刀具可以满足立体石雕粗加工、精加工和表面抛光等加工需求。

石雕机器人加工石材的原理是通过高速旋转的钎焊金刚石刀 具磨削加工去除多余的材料,从而达到预期的加工形状和加工精 度。石雕机器人的工件安装转台可以进行无限制旋转,有更高的自 由度和更大的加工范围,能够实现更细分的加工策略,完成更为复 杂曲面的雕刻加工。

对于复杂的石雕工艺品一般采用粗加工一二次粗加工一分区 精加工的工艺过程。粗加工一般选用直径较大的平底金刚石刀具



图 1 石材雕刻机器人 Fig. 1 Stone carving robot

快速去除材料,获得石雕工艺品的大致轮廓形状。二次粗加工选用直径为粗加工刀具直径 40%~60% 的球刀或锥形刀,这一步是为了去除粗加工刀具直径过大而无法加工到的残余材料^[12]。分区精加工则 根据需要的表面质量和模型精度选用直径为 1~4 mm 的球刀或锥形刀,按照模型的特点分区加工。其 中,粗加工过程去除材料最多、加工时间最长,是加工能耗的主要来源。因此,着重对石雕机器人粗加工 过程的能耗进行建模分析,并给出面向能效最优的加工参数指导。

1.2 粗加工过程的能耗分析

石雕机器人属于复杂的机电产品,具有能量消耗源多、能耗过程复杂、能耗效率低等特点。对石雕 机器人加工建立能耗模型是节能工艺优化的基础,而能耗分析则是能耗建模的前提。

从机器人加工过程的工作状态出发,分析石雕机器人运行各阶段的能耗。石雕机器人加工过程中的能耗包括启动能耗、空切能耗、磨削能耗。

1) 启动能耗。打开石雕机器人的电源后,机器人控制柜、示教器、显示屏、照明灯等开启。机器人 启动后的稳定状态为机器人启动状态,该状态下的能耗为稳定值。

2) 空切能耗。石雕机器人在加工前开启主轴电机和自动模式,机器人各轴上电运行,未参与磨削 前的状态为机器人空切运行状态。空切功率(P_u)计算式为

$$P_{\rm u} = kn + P_{\rm 0} \,. \tag{1}$$

式(1)中: n为主轴转速, $r \cdot \min^{-1}$; k为主轴功率系数; P_0 为机器人上电待机功率, W。

3) 磨削能耗。刀具切入加工工件进行磨削加工时的状态为磨削加工状态。磨削功率与加工参数 相关^[13],磨削功率(P_e)计算式为 400

$$P_{\rm c} = F_{\rm c} v_{\rm c} \, . \tag{2}$$

式(2),(3)中:F。为磨削力,N;v。为磨削速度,m・ $s^{-1}, v_c = \frac{\pi dn}{1.000 \times 60}, d$ 为刀具直径, mm。

由此可知,石雕机器人石材粗加工总能耗(Eall) 计算式为

$$E_{\rm all} = \int_{0}^{t} (P_{\rm c} + P_{\rm u}) \,\,. \tag{3}$$

建立石雕机器人粗加工能耗模型,如图2所示。 图 2 中: P 为功率; t 为时间。

粗加工过程能耗相关系数试验拟合 2

2.1 试验条件

1) 功率采集设备。测量仪器为 WT1800 型功率分析仪(日本横河电机株式会社),基本功率精度为

 $\pm 0.1\%$,简单平均值(DC)基本功率精度为 $\pm 0.05\%$,电 流/电压带宽为5 MHz,采样率约为2 MHz,电流测量范围 为 0.000 1~55.000 0 A。

2) 实验条件。以顶部粗加工为例,石雕机器人磨削加 工(图 3)中,主轴转数为 100~12 000 r·min⁻¹,最大功率 为800 W。机器人工具中心点(TCP)的最大速度为7300 $mm \cdot min^{-1}$,最大加速度为 35 m · s⁻²,有效负载为 7 kg。 实验平台为 ABB IRB1200, 工件材料为汉白玉, 磨削长度 和磨削宽度均为 60 mm,采用平行粗加工,加工方向垂直, 采用金刚石平底刀,刀具直径为7 mm。



图 2 石雕机器人粗加工能耗模型 Fig. 2 Energy consumption model of rough machining using stone carving robot



图 3 石雕机器人磨削加工 Fig. 3 Grinding processing using stone carving robot

2.2 空切功率

根据空切功率为主轴转速的线性函数,改变主轴转速,测定系统的空切功率,并建立空切功率模型。 选用常用的主轴转速(7 000~10 000 r • min⁻¹),故主轴转速分别设置为 7 000,7 600,8 200,8 800, 9 400 r • min⁻¹。不同主轴转速下的空切功率,如图 4 所示。通过线性拟合可得空切功率关于主轴转 速的计算式为 328

$$P_{\rm u} = 0.004 \ 1n + 289_{\circ}$$
 (4)

2.3 磨削功率

式(5)中:k。为单位磨削力。

磨削功率由磨削参数与主轴系统特性决定,其中, 磨削力由磨削宽度(a_e)、磨削深度(a_b)、主轴转速和进 给速度(v_i)等磨削参数及加工刀具、工件材料等非磨削 参数决定。

机床的磨削功率模型的经验公式[13]为

$$P_{\rm c} = \frac{k_{\rm s} a_{\rm p} a_{\rm e} v_{\rm f}}{60 \times 10^6} \,. \tag{5}$$

318 316 314 6500 7000 7500 8000 8500 9000 9500 10000 $n/r.min^{-1}$ 图 4 不同主轴转速下的空切功率 Fig. 4 Unloaded cutting power at different spindle speeds

326 324

322 Mⁿ

320

磨削功率模型在机床磨削过程有较好的精度,但在石雕机器人加工过程中并未得到验证,因此,通 过多因数正交实验,采用经验非线性回归拟合方式对磨削功率进行建模。

建立磨削功率与4参数指数关系的模型,有

$$P_{\rm c} = k_{\rm c} v_{\rm c}^{\rm x} v_{\rm f}^{\rm y} a_{\rm p}^{\rm z} a_{\rm e}^{\rm w} \,. \tag{6}$$

式(6)中:k,,x,y,z,w为待确定模型系数。

通过 L25 的正交实验表设计 4 因素 5 水平正交实验表。为了参数设置的合理性,提前进行预实验,确定最大可行磨削力对应下的加工参数,选取的磨削参数为磨削宽度、磨削深度、主轴转速和进给速度。 磨削功率的正交实验因素及水平,如表 1 所示。磨削功率的正交实验数据,如表 2 所示。

表1 磨削功率的正交实验因素及水平

因素水平	$a_{ m e}/{ m mm}$	$a_{ m p}/{ m mm}$	$n/r \cdot \min^{-1}$	$v_{ m f}/ m mm$ • $ m min^{-1}$
1	1.0	1.2	7 000	700
2	1.5	1.6	7 600	800
3	2.0	2.0	8 200	900
4	2.5	2.4	8 800	1 000
5	3.0	2.8	9 400	1 100

表 2 磨削功率的正交实验数据

1 1

Tab. 1 Orthogonal experimental factors and levels of grinding power

Tab. 2 Orthogonal experimental data of grinding power						
试验组号	$a_{ m e}/{ m mm}$	$a_{ m p}/ m mm$	$n/r \cdot min^{-1}$	$v_{\rm f}/{ m mm}$ • ${ m min}^{-1}$	${P}_{ m c}/{ m W}$	
1	1.0	1.2	7 000	700	327.363	
2	1.0	1.6	7 600	800	333.254	
3	1.0	2.0	8 200	900	339.219	
4	1.0	2.4	8 800	1 000	345.739	
5	1.0	2.8	9 400	1 100	353.070	
6	1.5	1.2	7 600	900	332.939	
7	1.5	1.6	8 200	1 000	340.794	
8	1.5	2.0	8 800	1 100	349.957	
9	1.5	2.4	9 400	700	349.227	
10	1.5	2.8	7 000	800	341.828	
11	2.0	1.2	8 200	1 100	340.749	
12	2.0	1.6	8 800	700	342.073	
13	2.0	2.0	9 400	800	354.129	
14	2.0	2.4	7 000	900	348.596	
15	2.0	2.8	7 600	1 000	363.296	
16	2.5	1.2	8 800	800	342.045	
17	2.5	1.6	9 400	900	352.790	
18	2.5	2.0	7 000	1 000	359.003	
19	2.5	2.4	7 600	1 100	367.908	
20	2.5	2.8	8 200	700	363.021	
21	3.0	1.2	9 400	1 000	352.761	
22	3.0	1.6	7 000	1 100	355.343	
23	3.0	2.0	7 600	700	352.629	
24	3.0	2.4	8 200	800	368.912	
25	3.0	2.8	8 800	900	379.087	

通过 Minitab 非线性拟合确定待定系数,可得磨削功率公式为

 $P_{\rm c} = 0.059 v_{\rm c}^{-0.076} v_{\rm f}^{0.778} a_{\rm p}^{1.011} a_{\rm e}^{0.875}$

(7)

磨削功率测量值与预测值对比,如图 5 所示。由图 5 可知:测量值与预测值拟合效果较好,最大预测偏差为 1.59%,验证了模型的可行性和适用性。

由此可获得当前加工条件下的系统功率模型为



图 5 磨削功率测量值与预测值对比

Fig. 5 Comparison of measured and predicated values of grinding power

$$P = P_{c} + P_{u} = 0.059 v_{c}^{-0.076} v_{f}^{0.778} a_{p}^{1.011} a_{e}^{0.875} + 0.004 \ 1n + 289$$
.

3 石雕机器人粗加工参数优化模型

磨削参数涉及磨削宽度、磨削深度、主轴转速和进给速度。每一个参量的变化都会影响能耗和加工 时间,综合研究磨削参数对目标的影响更具有实际意义,因此,将4个参数都作为优化变量。

3.1 磨削比能模型

磨削比能(SEC)是评估加工过程能量效率的一个常用的指标,它表征了单位材料去除体积下所消耗的能量,SEC 越小,则加工过程能量效率越高,SEC 基本公式^[14]为

$$\operatorname{SEC} = \frac{E_{\operatorname{all}}}{V} = \int_{0}^{t_{\mathrm{c}}} P / \int_{0}^{t_{\mathrm{c}}} R_{\circ}$$
(9)

式(9)中:V为材料去除总体积;t。为加工时间;R为材料去除率。

材料去除率是指单位时间磨削加工去除的材料体积,计算公式为

$$R = \frac{v_{\rm f} a_{\rm p} a_{\rm e}}{60} \,. \tag{10}$$

根据式(8)~(10)可得磨削比能模型为

$$SEC = \frac{0.059 v_{c}^{-0.076} v_{f}^{0.778} a_{p}^{1.011} a_{e}^{0.875} + 0.004 \ 1n + 289}{v_{f} a_{p} a_{e} / 60}$$
(11)

在机器人加工过程中去除相同的体积,需要的能耗越少,则磨削比能越小,综合能量效率也就越高。 工艺参数的优化是把最小磨削比能作为优化目标函数。

3.2 约束条件

石雕机器人粗加工参数的设定需要结合实际的约束,包括机器人负载能力约束、机器人运动约束和 刀具刚度约束等。优化变量需满足以下4个约束条件。

1) $F_{c} \leqslant F_{rob-spot}$, $F_{rob-spot}$ 为机器人最大负载力, 当磨削力超过这个值时, 机器人将报警并停机。

2) F_c≤n≤F_s,F_s是主轴刚度允许的最大磨削力。

3) nmin 《n 《nmax, nmin, nmax分别为主轴的最高转速和最低转速。

4) $v_{f_{\min}} \leq n \leq v_{f_{\max}}, v_{f_{\min}}, v_{f_{\max}}$ 分别为机器人 TCP 运动速度的最小值和最大值。

因此,石雕机器人粗加工参数优化模型为

$$\min F(n, v_{\rm f}, a_{\rm p}, a_{\rm e}) = \min \text{SEC},$$
s. t. $F_c \leqslant F_{\rm rolesnot}, \quad F_c \leqslant n \leqslant F_s, \quad n_{\rm min} \leqslant n \leqslant n_{\rm max}, \quad v_f \leq n \leqslant v_f \quad s$

$$(12)$$

4 基于模拟退火算法的能耗模型求解

4.1 模拟退火算法

模拟退火(SA)算法基于临界加热固体的热退火模拟,当固体(金属)通过加热到高温而进入熔融状态时,熔融金属中的原子彼此自由移动¹⁵³。随着温度降低,原子趋于有序,最终形成具有最小可能内能的晶体。SA算法是一种随机搜索方法,由于它具有按照概率接受差解的特性,在算法充分搜索的情况

(8)

下,可以有效避免陷入局部最优解。在温度(θ)趋于平衡时的概率公式为

$$p(E) = \exp\left(-\frac{\Delta E}{K_{\rm B}\theta}\right). \tag{13}$$

式(13)中: $K_{\rm B}$ 为波尔兹曼常数;E为能量; ΔE 为退火过程的能量变化,是算法的目标函数值。

SA 算法先从一个随机点开始最小化退火能量(目标函数),再通过尝试搜索空间中所有点的能量 值来寻找最小解。在这种选择较高冷却速度的方法中,陷入局部极小值的概率非常高。因此,为了逃离 局部极小值,应当选择适当的较慢冷却速度。

SA 算法过程分步实施的伪程序表示如下。

1) 初始化。随机生成初始点 x_0 ,设置初始温度 $\theta = \theta_{init}$,迭代次数 K = 0。

2) 计算当前能量。随机产生定义域内的初值 X_{κ} ,并计算该点的能量 $E_1 = F(X_{\kappa})$ 。

3) 随机生成邻域内的点。在 X_{K} 邻域随机产生新点 X_{K+1} ,并计算该点的能量 $E_{2} = F(X_{K+1})$,并确 定 $\Delta E = E_{2} - E_{1}$ 。

4) 判断评价函数 ΔE 。如果 $\Delta E < 0$,接受新解,直接跳至第 6 步;否则,随机生成 [0,1] 内的随机数 a,并计算概率 $p = \exp(-\Delta E/K_{\rm B}\theta)$ 。

5) 按照概率接受新解。如果 p>a,则接受新解,并进入第6步,否则,不接受新解,回到第3步。

6) 检查迭代次数。如果 K < N (N 为设定的最大次数),迭代次数增加 K = K + 1,回到第3步。

7) 停止条件。判断是否冷却充分,如果 $\theta \leq \theta_{\min}(\theta_{\min})$ 为温度最小值),则冷却充分,算法停止,输出最优解;否则,温度衰减 $\theta = k_t \theta(k_t)$ 为衰减系数),并回到第 3 步。

通过能耗目标函数与 SA 算法相关联,求解出最优加工参数。

4.2 MATLAB 模拟退火算法

基于模拟退火算法的概念,编写一个 MATLAB 代码,由此得到当前加工环境下最优的加工参数及 算法适应度进化曲线。由于加工参数主轴转速、进给速度、磨削深度、磨削宽度的取值范围差异很大,需 要把它们映射到统一的取值范围内,故进行线性变换,有

$$y = \frac{2 \times (Y - Y_{\min})}{(Y_{\max} - Y_{\min})} + 1_{\circ}$$
(14)

式(14)中:y为参数的统一化取值;Y为参数的真实值;Ymax为参数的最大值;Ymin为参数的最小值。

对每个参数进行变换,在程序中可得统一的取值范围[1,3]。SA 算法的参数设置如下:初温为 100 ℃;马科夫链长为 50;温度衰减系数为 0.99;搜索步长因子为 0.04;容差为 10⁻⁶。

计算后输出磨削比能最小时的加工参数,经式(9)逆 变换后可知:当主轴转速为6562 r•min⁻¹,进给速度为 1200 mm•min⁻¹,磨削宽度为3 mm,磨削深度为2.9 mm时,磨削比能达到最小值5.6 J•mm⁻³。因此,在保 证实际加工约束下,主轴转速取最小值,进给速度、磨削 深度和磨削宽度均取到最大值。算法适应度进化曲线, 如图6所示。对比经验加工时设定的加工参数:主轴转 速为8000 r•min⁻¹,进给速度为1000 mm•min⁻¹,磨 削深度为2 mm,磨削宽度为3 mm,去除同等体积的余 量,文中方法能耗可节约38.4%。

由此可知,石雕机器人在顶部粗加工选取材料去除





率越高的工艺参数,能量效率也越高。在较高材料去除率下,加工同等体积余量时,可明显缩短加工时间,使磨削时段的辅助系统、空切运行时间缩短。较大的工艺参数虽然会增大磨削功率,但相较于磨削能耗,石雕机器人基础能耗占比更为突出。因此,在一定程度上通过选择更加激进的工艺参数,缩短加工时间可以显著提高加工过程的能量效率,减少能量消耗。然而,对于石雕粗加工这个表面质量和精度要求不高的加工场景,过大的加工参数会加剧刀具磨损,缩短机器使用寿命,产生更大的噪声。文中仅从能耗最优目标给出工艺参数设定建议,实际的加工过程还需综合考虑其他目标。

5 结论

1) 基于模拟退火算法对建立的模型进行求解,得到磨削比能最小目标下的最优磨削加工参数,即 主轴转速为 6 562 r•min⁻¹,进给速度为 1 200 mm•min⁻¹,磨削深度为 3 mm,磨削宽度为 2.9 mm,此 时磨削比能为 5.6 J•mm⁻³,这比经验参数去除同等体积的余量能耗节约了 38.4%。

2)在当前加工环境下,采用更激进的工艺参数可以获得更高的能量效率,在同等工作量的基础上可以减少能量消耗。限制加工能量效率进一步提高的因素直接体现在对加工参数的约束上。如果采用更高材料去除率的加工参数将加大加工磨削力,使机器人磨削反力超过额定负载力,从而导致机器人触发保护停机。因此,实际加工过程应当在满足设备、工具等限制的前提下,选择更优的加工工艺参数。

参考文献:

- [1] 孙卫星,田静.践行宜业尚品理念 推进绿色低碳发展:《石材行业"十四五"发展规划纲要》简介及实施路径探讨 [J].石材,2022(9):8-14. DOI:10.14030/j. cnki. scaa. 2022.0143.
- [2] 柯晶莹,王惠婷.惠安石雕石材产业集群的现状及对策研究:基于惠安县洛阳石雕石材企业的问卷调查[J]. 宿州 教育学院学报,2021,24(1):22-25. DOI:10.3969/j.issn.1009-8534.2021.01.006.
- [3] 晏辉. 发展加工石材机器人可行性与必要性[J]. 石材, 2015(9):58-60. DOI:10. 14030/j. cnki. scaa. 2015. 0228.
- [4] 李丽,邓兴国,尚川博.面向能效的曲面数控加工刀具路径优化方法[J].机械工程学报,2017,53(11):184-194. DOI:10.3901/JME.2017.11.184.
- [5] 邓朝晖,符亚辉,万林林,等.面向绿色高效制造的铣削工艺参数多目标优化[J].中国机械工程,2017,28(19):2365-2372.DOI:10.3969/j.issn.1004-132X.2017.19.015.
- [6] 迟玉伦,范志辉,葛爱丽,等. 面向绿色高表面质量制造的硬态车削工艺多目标参数优化[J]. 表面技术,2023,52 (9):278-293. DOI:10.16490/j. cnki. issn. 1001-3660. 2023. 09. 024.
- [7] 张华.绿色高效切削加工工艺优化及其智能专家系统研究[D].湘潭:湖南科技大学,2018.
- [8] 武煜航. 面向绿色制造的数控加工工艺参数多目标优化研究[D]. 武汉:武汉科技大学,2022.
- [9] CAO Huajun, ZHOU Jin, JIANG Pei, et al. An integrated processing energy modeling and optimization of automated robotic polishing system[J]. Robotics and Computer-Integrated Manufacturing, 2020, 65: 101973. DOI: 10. 1016/j. rcim. 2020. 101973.
- [10] HSIEN-I L,RAJA M,FAUZY S W. BN-LSTM-based energy consumption modeling approach for an industrial robot manipulator[J]. Robotics and Computer-Integrated Manufacturing, 2023, 85: 102629. DOI: 10. 1016/j. rcim. 2023. 102629.
- [11] UHLMANN E, REINKOBER S, HOLLERBACH T. Energy efficient usage of industrial robots for machining processes[J]. Procedia CIRP, 2016, 48: 206-211. DOI: 10.1016/j. procir. 2016. 03. 2412.
- [12] 王柴志. 立体石雕机器人系统刚度对加工误差的理论及实验分析[D]. 厦门:华侨大学, 2020.
- [13] 陈日曜.金属切削原理[M].北京:机械工业出版社,2008.
- [14] 刘霜,刘飞,王秋莲. 机床机电主传动系统服役过程能量效率获取方法[J]. 机械工程学报,2012,48(23):111-116. DOI:10.3901/JME.2012.23.111.
- [15] BABAJANZADE-ROSHAN S, BEHBOODI-JOOIBARI M, TEIMOURI R, et al. Optimization of friction stir welding process of AA7075 aluminum alloy to achieve desirable mechanical properties using ANFIS models and simulated annealing algorithm[J]. International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2013, 69 (5/6/7/8): 1803-1818. DOI:10.1007/s00170-013-5131-6.

(责任编辑: 钱筠 英文审校: 吴跃勤)

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202310006

温湿耦合循环对 SBS 改性 沥青胶浆的性能影响



谭波1.2,樊雨竹1.2,李青1.2,谢恩连3,刘敬霜3

(1. 桂林理工大学 土木与建筑工程学院, 广西 桂林 541004;

2. 桂林理工大学 有色金属矿产勘查与资源高效利用省部共建协同创新中心,广西 桂林 541004;

3. 广西田新高速公路有限公司, 广西 崇左 532800)

摘要: 为探究 SBS 改性沥青胶浆在自然环境中受到温度和湿度共同作用下的性能变化,模拟温湿耦合循环 环境进行室内试验。在不同温度区间的循环条件下,采用锥入度试验、软化点试验、延度试验、布氏旋转黏度 试验和双边缺口拉伸试验评价 SBS 改性沥青胶浆的宏观性能变化;结合红外光谱测试,从化学成分角度探究 其性能变化机理。研究结果表明:随着温湿耦合循环次数增加,SBS 改性沥青胶浆出现变硬、变脆等老化现 象,其宏观性能发生衰退;在相同试验条件下,温度区间的温差越大,对胶浆性能的影响越大;在温湿耦合循环 后,SBS 改性沥青胶浆的亚砜基指数增大,丁二烯指数下降。

关键词: SBS 改性沥青胶浆;湿热环境;耦合老化;微观分析;老化性能 中图分类号: U 414 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2024)04-0478-09

Effect of Temperature and Humidity Coupling Cycles on Performance of SBS Modified Asphalt Mastic

TAN Bo^{1,2}, FAN Yuzhu^{1,2}, LI Qing^{1,2}, XIE Enlian³, LIU Jingshuang³

(1. School of Civil and Architectural Engineering, Guilin University of Technology, Guilin 541004, China;
 2. Collaborative Innovation Center for Exploration of Nonferrous Metal Deposits and Efficient Utilization of Resources,

Guilin University of Technology, Guilin 541004, China;

3. Guangxi Tianxin Expressway Limited Company, Chongzuo 532800, China)

Abstract: In order to investigate the performance changes of SBS modified asphalt mastic under the joint action of temperature and humidity in the natural environment, indoor tests were carried out to simulate the temperature and humidity coupling cyclic environment. Under the cyclic conditions of different temperature intervals, the cone penetration test, the softening point test, the ductility test, Brookfield viscosity test, and double-edge-notched tension test were used to evaluate the macroscopic property changes of SBS modified asphalt mastic; combining with the infrared spectrometer, the mechanism of the performance change was studied from the perspective of chemical composition. The results show that: with the increase of the number of temperature and humidity coupling cycles, the SBS modified asphalt mastic appears to become hard, brittle and other aging phenomena, and its macroscopic properties declines; under the same test conditions, the higher the tem-

通信作者: 谭波(1977-),男,教授,博士,主要从事路基路面工程及新型建筑材料的研究。E-mail:bbsz2004@163. com。

收稿日期: 2023-10-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52268039)

perature difference between the intervals of the mastic has a greater impact on its performance; the sulfoxide index of SBS modified asphalt mastic increases after the temperature and humidity coupling cycle, and the butadiene index also decreases.

Keywords: SBS modified asphalt mastics; hot and humid environment; coupled aging; micro-analysis; aging property

我国季冻区夏季高温多雨和冬季寒冷干燥交替情况出现,这样的极端环境使沥青路面长期处于温度和湿度的耦合作用下,造成沥青材料出现内部损伤,容易出现车辙、坑槽、松散等路面病害,严重影响了沥青路面的使用寿命和路用性能^[1-3]。

国内外学者对沥青和沥青混合料在极端环境下的变化规律进行了研究。李海军等^[4] 对沥青进行 热-氧-水老化,研究发现水分的存在会加速沥青的老化。Chen 等^[5] 对不同水老化条件下的沥青疲劳性 能进行研究,并建立模型预测水老化后沥青的疲劳寿命。念腾飞等^[6] 通过灰色关联熵理论对沥青在冻 融循环下的流变性能参数与沥青特征官能团进行关联度分析。张勤玲等^[7] 对比研究了基质沥青和 SBS 改性沥青在干湿-冻融条件下的化学特性变化,发现 SBS 改性沥青的抗水老化性能要优于基质沥青。 吴建涛等^[8] 通过自主研发的试验装置模拟高温、高湿环境,研究回收沥青在水分-老化耦合作用下各项 性能的变化规律。王龙等^[9] 通过原子力显微镜,研究发现冻融循环后沥青胶浆的微观结构遭到破坏。 Cheng 等^[10] 通过建立的数学模型和粘弹性连续损伤理论评估了冻融循环下沥青和沥青胶浆的流变性 能。郭庆林等^[11] 发现在高温、高湿的环境下,沥青混合料的抗拉强度、低温杨氏模量和中温动态劲度模 量降低。关于温度和湿度对沥青性能影响的研究已成为业界颇为关注的问题,但目前针对不同温差变 化和湿度共同作用下 SBS 改性沥青胶浆的影响研究却较少。

本文采用一种更符合自然环境中高低温变化和湿度耦合的模拟试验方式,在不同温湿循环条件下, 进行锥入度试验、软化点试验、延度试验、布氏旋转黏度和双边缺口拉伸试验(DENT)以评估 SBS 改性 沥青胶浆的性能变化,并结合傅里叶变换红外光谱(FTIR)从化学成分角度探究其性能变化机理。

1 材料与方法

1.1 材料及指标

采用 SBS 改性沥青,其技术指标,如 软化点/C 85.6 ≥ 60 T 0606 表 1 所示,满足 JTG F40-2004《公路沥 <u>延度(5 C,5 cm · min⁻¹)/cm</u> 24.6 ≥ 20 T 0605 青路面施工技术规范》。矿粉为石灰石粉,其技术指标,如表 2 所示,满足 JTJ E42-2005《公路工程集 料试验规程》。

 $<\!4$

T 0354

表 2 矿粉的技术指标

技术指标	试验值	规范值	试验方法	技术指标	试验值	规范值	试验方法
表观密度/g•cm ⁻³	2.706	≥2.50	T 0352	通过率(颗粒范围<0.6 mm)/%	100.0	100	T 0351
含水量/%	0.4	≪1	T 0332	通过率(颗粒范围<0.15 mm)/%	91.6	$90\!\sim\!100$	T 0351
亲水系数	0.4	< 1	T 0353	通过率(颗粒范围<0.075 mm)/%	81.7	$75\!\sim\!100$	T 0351

Tab. 2 Technical index of mineral powder

矿粉塑性指数/% 2.8 1.2 沥青胶浆样品制备

将 SBS 改性沥青置于 170 ℃的烘箱中加热至流动状态,倒入 180 ℃的油浴锅中。将矿粉放入 105 ℃的烘箱加热 4 h 以除去水分,称取与沥青质量比为 1 : 1 的矿粉,少量多次加入沥青中;采用增力搅拌器进行搅拌,搅拌速率为 1 000 r • min⁻¹,时间为 30 min。将沥青胶浆倒入模具中,制成所需样品。

1.3 温湿耦合循环试验

参考文献[9-10]模拟室内温湿耦合循环试验。为研究不同工况下 SBS 改性沥青胶浆的性能变化规律,设置不同的循环温度区间(-20~60 ℃,-20~40 ℃,0~60 ℃,0~40 ℃),其中,温湿耦合循环中的低温条件是由低温箱控制,高温高湿条件是由恒温水浴箱控制。先将 SBS 改性沥青胶浆样品放入

表 1 SBS 改性沥青的技术指标 Tab 1 echnical index of SBS modified asph

	Tab. 1 echnical index of SBS modified asphalt						
	技术指标	试验值	规范值	试验方法			
	针入度(25 ℃,100 g,5 s)/0.1 mm	46.1	$40\!\sim\!60$	T 0604			
	软化点/℃	85.6	$\geqslant 60$	T 0606			
i	延度(5 °C,5 cm • min ⁻¹)/cm	24.6	≥20	T 0605			

低温箱中持续冰冻 12 h,再放入恒温水浴箱中 12 h,此为一个循环。分别循环 3,6,9,12 次,重复循环过 程完成不同次数的温湿耦合循环,循环结束后将样品取出,待样品静置至室温后,进行后续试验。

1.4 常规试验

参考 JTG E20-2011《公路工程沥青及沥青混合料试验规程》,对温湿耦合循环后的 SBS 改性沥青

胶浆分别进行15和40℃锥入度试验、软化点(环球法)试验和5℃延度试 验。沥青胶浆采用常规的针入度试验容易出现数据失真的情况[12-13],因此, 通过 15 和 40 ℃下的 SBS 改性沥青胶浆锥入度试验,分别评价其温湿耦合 循环作用后的低温抗剪性能和高温抗剪性能。锥入度试验装置,如图1所 示。参照 JTG E20-2011 中的针入度试验方法,将标准针换作锥针,得到不 同工况下的 SBS 改性沥青胶浆锥入度,并计算其抗剪强度(τ),即

$$\tau = 981Q\cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) / \left(\pi h^2 \tan\left(\frac{\alpha}{2}\right)\right).$$
(1)

式(1)中:Q为锥针、连杆和砝码总质量;a为锥针针尖角度;h为锥入度。 1.5 布氏旋转黏度试验

参考 JTG E20-2011《公路工程沥青及沥青混合料试验规程》, 洗用布氏旋转黏度仪测试 SBS 改性 沥青胶浆在温湿耦合循环下不同温度(135,145,155,165,175℃)的黏度,并计算其黏流活化能。

1.6 双边缺口拉伸(DENT)试验

采取双边缺口拉伸试验评价 SBS 改性沥青胶浆在温湿耦合循 环作用下的中温抗裂性能变化规律。参考 AASHTO TP 113-2015 规范,采用万能材料试验机,设置拉伸速率为 50 mm • min⁻¹,试验 温度为25℃。对同一种SBS改性沥青胶浆,制备3种不同韧带宽度 (5,10,15 mm)的试件进行测试,试验模具,如图2所示。

1.7 傅里叶红外光谱(FTIR)试验

对不同工况下的 SBS 改性沥青胶浆进行傅里叶红外光谱测试, 观察主要官能团振动谱带的变化情况,进一步探究 SBS 改性沥青胶 浆在温湿耦合循环下的性能衰退机理。试验采用 Nicolet 6700 型傅

里叶红外光谱仪,测试范围为 $4000\sim500$ cm⁻¹,分辨率为4 cm⁻¹,扫描次数为32次。

试验结果与分析 2

2.1 常规试验

2.1.1 维入度 不同工况下 SBS 改性沥青胶浆在试验温度 (θ) 为 15,40 ℃时的抗剪强度,如图 3 所示。 图 3 中: θ ,为循环过程的温度。



图 3 不同工况下 SBS 改性沥青胶浆在 15,40 °C下的抗剪强度

Fig. 3 Shear strength of SBS modified asphalt mastic at 15 and 40 °C under different conditions

由图 3 可知:不同温度差下 SBS 改性沥青胶浆的抗剪强度增幅存在差异,在温差更大的区间循环 的 SBS 改性沥青胶浆抗剪强度的增幅更明显。具体表现为与未参与温湿耦合循环的对照组相比,SBS

https://hdxb. hqu. edu. cn/

图 1 锥入度试验装置 Fig. 1 Cone penetration

test device



图 2 双边缺口拉伸试验模具 Fig. 2 Test mold of

double-edge-notched tension

2024 年

改性沥青胶浆在温度区间为-20~60 ℃,-20~40 ℃,0~60 ℃,0~40 ℃内循环 12 次后,其 15 ℃时的抗剪强度分别增大了 47.5%,36.3%,32.1%,24.4%,其 40 ℃时的抗剪强度分别增大了 50.9%, 18.1%,45.7%,15.7%。随着温湿耦合循环作用的进行,不同循环温度区间下的沥青胶浆抗剪强度均 呈上升趋势,说明随着温湿耦合循环作用的进行,沥青质的质量增加,轻质组分含量降低,SBS 改性沥青 胶浆的弹性成分增多,胶浆变硬、变脆。当试验温度为 40 ℃时,在-20~40 ℃温度区间下循环的 SBS 改性沥青胶浆的抗剪强度增幅要明显小于在 0~60 ℃温度

改性沥青胶浆的抗剪强度增幅要明显小于在 0~60 ℃温度 区间下循环的沥青胶浆抗剪强度。说明在更高温度区间的 温湿耦合循环下,SBS 改性沥青胶浆硬化现象越明显。 2.1.2 软化点 不同工况下 SBS 改性沥青胶浆的软化点 试验结果,如图 4 所示。

由图 4 可知:在同样的循环温度区间下,随着温湿耦合 循环次数的增加,SBS 改性沥青胶浆软化点变化较小,且未 呈现出一致性的变化规律,这一结果与文献[14]的研究结果 一致,说明用软化点难以表征其高温形状的变化。这可能是 因为 SBS 改性沥青的软化点变化是由 SBS 改性剂和基质沥 青综合作用决定,SBS 改性剂在 SBS 改性沥青胶浆内部形 成了网络状结构包裹住了沥青,使沥青结构变得更稳定,而 温湿耦合循环作用对 SBS 改性剂的网络状结构产生损害较 少,导致软化点变化不显著。

2.1.3 延度 不同工况下 SBS 改性沥青胶浆的延度试验结果,如图 5 所示。图 5 中: l 为延度。

由图 5 可知:在相同循环温度区间下,随着温湿耦合循 环次数的增加,SBS 改性沥青胶浆的延度变化趋势一致,均 呈现下降趋势,此外,不同温差大小对 SBS 改性沥青胶浆延 度的影响程度不同,循环温度区间的温差越大,胶浆延度下 降幅度越大;而在循环温度区间温差相同的情况下,在高温 区间循环的胶浆延度受温湿耦合循环作用的影响要比在低 温区间循环所受的影响更大。说明温湿耦合循环使胶浆的 低温抗裂性能下降,且温差越大、温度越高,胶浆的低温抗裂 性能下降越明显。主要是因为温湿耦合循环使芳香分向胶 质和沥青质转化,SBS 改性沥青胶浆变硬,低温延展性降低, 温差越大、温度区间越高,越加剧了这种现象。

2.2 布氏旋转黏度试验

不同工况下 SBS 改性沥青胶浆的布氏旋转黏度试验结果,如图 6 所示。图 6 中:η为黏度。 由图 6 可知:在相同试验温度下,随着循环次数的增多,SBS 改性沥青胶浆黏度总体呈现出递增的 趋势,温湿耦合循环后胶浆的黏度增幅在较低的试验温度内表现更加明显,随着试验温度越高,黏度增







95

≫9次温湿耦合循环 №12次温湿耦合循环 80 0次温湿耦合循环 3次温湿耦合循环 70 6次温湿耦合循环 60 50 //mm 40 30 20 10 0 -20~40 0 - 40-20~60 0~60 θ / C 图 5 不同工况下 SBS 改性沥青 胶浆的延度试验结果



481



图 6 不同工况下 SBS 改性沥青胶浆的布氏旋转黏度试验结果

Fig. 6 Brookfield viscosity test results of SBS modified asphalt mastics under different conditions 小,沥青胶浆的黏度增幅减小。这是因为 SBS 改性沥青胶浆经过温湿耦合循环后,轻组分挥发或向重组分转化,重组分占比增大,导致胶浆内部分子间的运动阻力增大,黏度增大,在温差越大的区间内循环,反应速率越快。

Arrhrenius 方程可以用来表征不同温度下化学反应速率的变化关系。SBS 改性沥青胶浆在进行温湿耦合循环过程中进行了复杂的化学反应,黏度发生变化,可以通过建立以黏度为参数的 Arrhrenius 方程来表征 SBS 改性沥青胶浆在温湿耦合循环过程中的反应进程。

通过 Arrhrenius 方程可以列出 SBS 改性沥青胶浆黏度与温度之间的关系为

$$\lg(\eta(\theta)) = \lg K + E_{\eta} / (2.303R\theta) \,. \tag{2}$$

式(2)中: $\eta(\theta)$ 为温度 θ 时的黏度;K为材料常数;R为玻尔兹曼常数;E₁为沥青黏流活化能。

黏流活化能是指高分子材料在流动过程中,流动单元(即分子链段)用于克服位垒,由原位置跃迁到 附近"空穴"所需的最小能量。沥青黏流活化能 E_η 能够表征沥青胶浆流动的难易程度和温度敏感 性^[15]。根据式(2),对 $lg(\eta(\theta))$ 和 $1/\theta$ 作图,并对数据进行线性回归,所得直线斜率为 $E_\eta/(2.303R)$,即 可得到 E_η 值。沥青黏流活化能计算结果,如表 3 所示。表 3 中:N 为循环次数; R^2 为决定系数。

表 3 沥青黏流活化能的计算结果

温度区间	N/次	lg(η(θ))-1/θ 回归模型	R^2	Р	E_{η}/kJ • mol^{-1}
	0	y=3 923.8 $x-8.674$ 18	0.990	0.000 3	75.13
	3	y=3 965.9 $x-8.744$ 36	0.993	0.000 1	75.94
$-20\!\sim\!60~^\circ\!\mathrm{C}$	6	y=3 978. $1x-8.737$ 47	0.994	0.000 1	76.17
	9	$y = 4 \ 011.8x - 8.790 \ 68$	0.995	0.000 1	76.81
	12	$y = 4 \ 062.6x - 8.886 \ 64$	0.994	0.000 1	77.79
	0	y=3 923.8 $x-8.674$ 18	0.990	0.000 3	75.13
	3	y=3 941.0 $x-8.691$ 52	0.996	0.000 1	75.46
$-20\!\sim\!40~^\circ\!\mathrm{C}$	6	y=3 955.1 $x-8.697$ 30	0.999	0.000 1	75.73
	9	y=3 983.2 $x-8.740$ 42	0.999	0.000 1	76.27
	12	$y = 4 \ 005.6x - 8.77071$	0.999	0.000 1	76.70
	0	y=3 923.8 $x-8.674$ 18	0.990	0.000 3	75.13
	3	y=3 945.7 $x-8.695$ 62	0.997	0.000 0	75.55
$0\sim\!60$ °C	6	y=3 964.8 $x-8.714$ 20	0.998	0.000 0	75.91
	9	y=3 981.6 $x-8.733$ 65	1.000	0.000 0	76.24
	12	$y = 4 \ 010.\ 3x - 8.\ 780\ 18$	0.999	0.000 0	76.79
	0	y=3 923.8 $x-8.674$ 18	0.990	0.000 3	75.13
0∼40 °C	3	y=3 939.0 $x-8.687$ 76	0.997	0.000 0	75.42
	6	y=3 944.9x-8.686 74	0.999	0.000 0	75.53
	9	y=3 964. $4x-8.719$ 90	0.998	0.000 0	75.91
	12	y=3 981.5 $x-8.748$ 41	0.998	0.000 0	76.23

Tab. 3 Calculation result of visco-flow activation energy

由表 3 可知:在不同温湿耦合循环次数下,SBS 改性沥青胶浆的 $lg(\eta(\theta))$ 与 $1/\theta$ 有良好的线性关

系,决定系数 R² 均大于 0.990,P 值均小于 0.05,表明回归方程与试验结果之间的差异具有统计学意 义;在不同循环温度区间内,随着温湿耦合循环次数的增加,黏流活化能 E_n 值均呈上升趋势,但增幅存 在差异;在-20~60 ℃区间内循环的 SBS 改性沥青胶浆的 E_n 增幅最大,其 12 次循环后的 E_n 达到了 77.79 kJ·mol⁻¹,在-20~40 ℃,0~60 ℃区间内循环的沥青胶浆的 E_n 增幅次之,在 0~40 ℃区间内 循环的沥青胶浆的 E_n 增幅最小,其 12 次循环后的 E_n 为 76.23 kJ·mol⁻¹。这可能是因为 SBS 改性沥 青胶浆经过温湿耦合循环后,SBS 改性沥青胶浆在高温、高湿环境下生成亚砜基等极性含氧官能团,相 对分子质量增大,分子间作用力变大,导致沥青分子流动所需的能量变大;同时,SBS 改性沥青胶浆在高 温、高湿环境下,组分发生变化,轻质组分一部分挥发,一部分转化为重组分,沥青变稠,改性剂与沥青间 的作用力及界面粘滞作用变强,沥青材料运动时需要克服的能全越高,因此,经过温湿耦合循环后黏流

2.3 抗断裂性能变化

根据上述试验结果发现,在-20~60 ℃区间内循环的 SBS 改性沥青胶浆的性能变化最显著,因此, 选取-20~60 ℃区间内循环的 SBS 改性沥青胶浆作为研究对象。根据双边缺口拉伸试验结果,绘制不 同韧带宽度的 SBS 改性沥青胶浆的荷载-位移曲线,如图 7 所示。图 7 中:*P*。为荷载;Δ 为位移;*L* 为试 件的韧带宽度。



图 7 不同韧带宽度的 SBS 改性沥青胶浆的荷载-位移曲线

Fig. 7 Load-displacement curves of SBS modified asphalt mastics with different ligament widths

SBS 改性沥青胶浆总断裂功主要由基本断裂功和塑性变形功组成,可由荷载-位移曲线面积确定, 其表达式为

$$W_{t} = W_{e} + W_{P} = w_{e} \times LB + \beta w_{P} \times BL^{2}$$
(3)

式(3)中:W_t为总断裂功;W_e为基本断裂功;W_P为塑性变形功;w_e为断裂比基本功;w_P为断裂比塑性 功;B为试样厚度;β为描述塑性区形状的几何特征参数。

$$w_{t} = W_{t} / BL_{\circ}$$
(4)

联立式(3)和式(4),可得

$$w_{\rm t} = w_{\rm e} + \beta w_{\rm P} \times L_{\circ} \tag{5}$$

式(5)中:wt 为总比断裂功。

根据式(5)对 w_t 断裂比基本功和韧带宽度 L 进行线性拟合,得到的直线截距为 w_e ,斜率为 βw_P 。 根据韧带宽度 5 mm 的胶浆试件的峰值荷载和试样的几何尺寸,计算得到试件净截面应力为

$$\sigma_{\rm n} = P_{\rm neak} / (\overline{B} \, \overline{L})_{\rm o} \tag{6}$$

式(6)中: σ_n 为净截面应力; P_{peak} 为峰值荷载;B表示韧带宽度为 5 mm 试件的平均厚度;L表示韧带宽 度为 5 mm 试件的实测平均韧带宽度。

试件的临界裂纹尖端位移(CTOD)的计算式为

$$\delta_{\rm t} = w_{\rm e} / \sigma_{\rm n} \, . \tag{7}$$

式(7)中: δ, 为裂纹尖端张开位移,即CTOD。由于CTOD值与沥青混合料疲劳性能之间有高相关性^[16-17],因此,CTOD值能够表征沥青的中温抗断裂性能。

由图 7 可知:SBS 改性沥青胶浆的荷载-位移曲线变化呈现 3 个阶段,第1 阶段随着位移的缓慢增

加,荷载迅速增大;第2阶段在到达屈服荷载后,试件拉伸位移持续增加,但荷载缓慢下降;第3阶段荷载急剧下降至试件断裂。这可能是 SBS 改性剂在胶浆内部形成的交联网状结构引起的。

不同循环次数下 SBS 改性沥青胶浆的 DENT 结果,如表4所示。由图7和表4可知:随着温湿 耦合循环次数的增加,沥青胶浆失效变形降低,峰 值荷载增加,说明温湿耦合循环后,SBS 改性沥青 胶浆变硬,延展性变差。

由表 4 可以看出:SBS 改性沥青胶浆 CTOD 随着温湿耦合循环次数的增加而减小,CTOD 越

表 4 不同循环次数下 SBS 改性沥青胶浆的 DENT 结果

Tab. 4 DENT results for SBS modified asphalt

mastics under different cycle times

N/次	$w_{ m e}/kJ$ • m ⁻²	R^2	CTOD/mm
0	17.673	0.996 2	17.03
6	13.330	0.972 8	11.99
12	11.501	0.998 4	9.57

低,沥青胶浆越接近脆性状态,更容易遭受到永久性损伤,温湿耦合循环作用削弱了 SBS 改性沥青胶浆 的中温抗断裂性能,循环次数越多,效果越显著,这与峰值荷载和失效变形的分析结果一致。原因可能 是一方面在温度和湿度的共同作用下,SBS 改性沥青胶浆内部孔隙数量变多、孔径增大,进而为水进入 胶浆内部提供通道,最终破坏胶浆内部结构;另一方面,SBS 改性沥青胶浆中的亲水极性分子和一些水 溶性物质与水结合,导致胶浆变脆变硬^[18-19]。

2.4 化学成分变化

采用傅里叶变换红外光谱仪分别对 SBS 改性沥青、石灰石矿粉和 SBS 改性沥青胶浆,以及不同循 环温度下循环 12 次后的 SBS 改性沥青胶浆进行测试,结果分别如图 8,9 所示。图 8,9 中:A 为吸光度; ν 为波数。





Fig. 8 FTIR spectra of SBS modified asphalt, limestone mineral powder and SBS modified asphalt mastics



Fig. 9 FTIR spectra of SBS modified asphalt mastics in different cycling temperatures

SBS 改性沥青胶浆并没有产生新的特征吸收峰,其特征吸收峰是 SBS 改性沥青和石灰石矿粉的特征吸收峰的叠加,表明石灰石矿粉与 SBS 改性沥青主要通过物理吸附接触,没有发生明显的化学反应。结合图 8 可知,在温湿耦合循环作用下,石灰石矿粉的化学成分稳定,沥青胶浆的特征官能团的变化主要是因为沥青的特征官能团发生变化,因此,可以用沥青的特征官能团变化率来表征温湿耦合循环作用 对沥青胶浆的影响。

1700 cm⁻¹处的羰基吸收峰、1031 cm⁻¹处的亚砜基吸收峰和966 cm⁻¹处丁二烯吸收峰的变化可 以用来表征 SBS 改性沥青老化程度^[20-22]。根据朗伯-比尔定律,选取波长范围 2000~600 cm⁻¹的沥青 指纹区域峰面积和作为基准,计算循环前、后胶浆的羰基指数($I_{c=0}$)、丁二烯指数(I_B)、亚砜基指数 ($I_{s=0}$)。 $I_{c=0}$, I_B , $I_{s=0}$ 的计算式分别为

$$I_{\rm C=0} = A_{1\,700} / \sum A_{2\,000 \sim 600} \,, \tag{8}$$

$$I_{\rm B} = A_{966} / \sum A_{2\ 000\sim 600} \,, \tag{9}$$

$$I_{\rm S=0} = A_{1\,031} / \sum A_{2\,000\,\sim\,600} \,. \tag{10}$$

式(8)~(10)中:A2000~600为选取波长范围2000~600 cm⁻¹的沥青指纹区域峰面积和,即

 $A_{2\ 000\sim 600} = A_{1\ 600} + A_{1\ 456} + A_{1\ 376} + A_{1\ 162} + A_{1\ 031} + A_{966} + A_{861} + A_{810} + A_{744} + A_{722} \,.$

对温湿耦合循环前、后的 SBS 改性沥青胶浆的化学成分变化进行定量分析^[23-24],结果如表 5 所示。

表 5 循环前、后 SBS 改性沥青胶浆 FITR 图谱特征官能团指数计算结果

Tab. 5 Calculation results of characteristic functional group index in FITR spectra

of SBS modified asphalt mastics before and after cycling

特征官能团指数	未循环	温度区间			
		$-20 \sim 60 \ ^{\circ}\mathrm{C}$	$-20 \sim 40 \ ^{\circ}C$	$0\!\sim\!60~^\circ\mathrm{C}$	$0\!\sim\!40$ °C
$I_{ m B}$	0.006 86	0.002 82	0.004 35	0.003 85	0.005 48
$I_{\rm S=O}$	0.016 32	0.031 71	0.024 95	0.024 54	0.024 99

结合图 9 和表 5 可知:温湿耦合循环前、后的 SBS 改性沥青胶浆在波长 1 700 cm⁻¹处均没有发现 羰基吸收峰,可能是因为试验设置的温湿耦合变化较温和,羰基生成数量较少,未被检测到。在不同温 度循环区间下,SBS 改性沥青胶浆的 *I*_{s=0}具有相同的变化趋势,随着温湿耦合循环次数的增加,*I*_{s=0}值 不断增大,与未循环的沥青胶浆相比,-20~60 ℃,-20~40 ℃,0~60 ℃,0~40 ℃区间内循环 12 次 后的沥青胶浆的 *I*_{s=0}分别增大了 94.30%,52.88%,50.37%,53.12%,温湿耦合循环作用后 SBS 改性 沥青胶浆的亚砜基含量增加。温湿耦合循环次数和温度差的增加会不同程度地加剧 SBS 改性沥青胶 浆的老化,这与前期常规试验、布氏旋转黏度试验及 DENT 试验的结果相吻合。这是因为沥青胶浆在 高温和有氧的作用下,形成氢过氧化物,其作为氧化剂,将沥青分子中的硫醚、硫醇等含硫官能团氧化成 亚砜基官能团。

而随着温湿耦合循环次数的增加,*I*_B 值呈下降趋势,-20~60 ℃区间内循环的沥青胶浆的 *I*_B 值降 幅最大,达到 58.89%。表明 SBS 改性剂在温湿循环作用下发生了降解,水分子与 SBS 聚合物分子相 互作用,加速了 SBS 改性剂中聚丁二烯链段中 C=C 双键断裂,破坏了 SBS 形成的网络状结构。

3 结论

1) 温湿耦合循环作用下,随着循环次数的增加,SBS 改性沥青胶浆的物理指标发生变化,主要变现 为抗剪强度增加,延度降低,软化点变化不明显,黏度下降,沥青黏流活化能增加。说明 SBS 改性沥青 胶浆在温湿耦合循环环境下,其宏观性能指标发生劣化,出现流动性下降、硬化变脆等老化现象。

2)当温湿耦合循环次数相同时,循环区间温度差越大的 SBS 改性沥青胶浆老化现象越明显;在温 差相同的情况下,在更高的温度区间内循环的 SBS 改性沥青胶浆的高温抗剪强度和延度变化更显著。因此,在实际环境中应该着重关注沥青路面在新疆、西藏等大温差地区的服役过程中的状态。

3) DENT 试验结果表明,随着温湿耦合循环次数的增加,SBS 改性沥青胶浆失效变形,CTOD 值降低,峰值荷载增加,说明温湿耦合循环作用削弱了 SBS 改性沥青胶浆的中温抗断裂性能。

4) FITR 测试结果表明,SBS 改性沥青胶浆在不同温度区间的温湿耦合循环作用下,1 700 cm⁻¹处 没有出现羰基吸收峰,可能是由于试验环境对于羰基的生成来说较为温和;表征 SBS 改性沥青胶浆老 化的亚砜基指数上升,丁二烯指数下降,且循环区间的温度差越大,变化越明显。温湿耦合循环次数和 温度差的增加会不同程度地加剧 SBS 改性沥青胶浆的老化,FITR 测试结果与宏观性能结果相符。

参考文献:

- [1] CHEN Mingyuan, GENG Jiuguang, CHEN Huaxin, et al. Effect of water aging on the fatigue performance of asphalt binders using the linear amplitude sweep[J]. Construction and Building Materials, 2021, 304:124679. DOI:10.1016/ j. conbuildmat. 2021. 124679.
- [2] GONG Yan, XU Jian, CHANG Rong, et al. Effect of water diffusion and thermal coupling condition on SBS modified asphalts' surface micro properties[J]. Construction and Building Materials, 2020, 273(s1): 121758. DOI: 10.1016/j. conbuildmat. 2020. 121758.
- [3] 田煜,李廷,彭菲,等. SBS 改性沥青老化行为研究[J]. 化工新型材料,2017,45(5):37-39.
- [4] 李海军,黄晓明,王宏畅. 道路沥青在使用过程中的水老化[J]. 石油学报(石油加工),2005,21(4):75-78. DOI:10. 3969/j. issn. 1001-8719. 2005. 04. 012.
- [5] CHEN Mingyuan, GENG Jiuguang, CHEN Huaxin, et al. Effect of water aging on the fatigue performance of asphalt

binders using the linear amplitude sweep[J]. Construction and Building Materials, 2021, 304:124679. DOI:10.1016/ j. conbuildmat. 2021. 124679.

- [6] 念腾飞,李萍,林梅.冻融循环下沥青特征官能团含量与流变参数灰熵分析及微观形貌[J].吉林大学学报(工学版),2018,48(4):1045-1054. DOI:10.13229/j.cnki.jdxbgxb20170802.
- [7] 张勤玲,黄志义. 干湿-冻融循环作用下沥青水老化的微观特性[J]. 建筑材料学报,2020,23(4):920-926. DOI:10. 3969/j. issn. 1007-9629. 2020. 04. 026.
- [8] 吴建涛,马鑫源,陈俊,等.水分-老化耦合作用对沥青性能的影响[J].公路,2021,66(11):275-284.
- [9] 王龙,马海龙,王天伟,等.石灰岩矿粉性质对沥青胶浆性能的影响因素及其技术标准[J].哈尔滨工业大学学报, 2022,54(9):7-16.DOI:10.11918/202112048.
- [10] CHENG Yongchun, WANG Haitao, WANG Wensheng, et al. Rheological evolution mechanisms of asphalt binder and mastic under freeze-thaw cycles[J]. Construction and Building Materials, 2023, 372:130780. DOI:10.1016/j. conbuildmat. 2023. 130780.
- [11] 郭庆林,李懿明,胡俊兴,等. 温湿度环境对沥青混合料中低温力学性能的影响[J]. 公路交通科技,2022,39(1):10-16. DOI:10. 3969/j. issn. 1002-0268. 2022. 01. 002.
- [12] 冯新军,陈旺,李旺. 硅烷偶联剂改性煤矸石粉沥青胶浆路用性能及改性机理[J]. 建筑材料学报,2020,23(5): 1121-1129. DOI:10.3969/j. issn. 1007-9629. 2020. 05. 018.
- [13] 冯新军,解明卫,陈旺,等.活化煤矸石粉 SBS 改性沥青胶浆路用性能和改性机理[J].建筑材料学报,2020,23(6): 1440-1449. DOI:10.3969/j.issn.1007-9629.2020.06.024.
- [14] 张争奇,崔文社,马良,等. SBS 改性沥青软化点试验特性[J]. 长安大学学报(自然科学版),2007,27(6):6-10. DOI:10.19721/j. cnki.1671-8879.2007.06.002.
- [15] 李宁利,赵新坡,孙吉书,等.基于表观黏度的橡胶沥青老化动力学[J].合成橡胶工业,2016,39(3):229-233. DOI: 10.3969/j.issn.1000-1255.2016.03.013.
- [16] CHEN Yu,ZHENG Wenhua,XU Shibing, et al. Characteristics of mineral fillers and their effects on mastic fracture resistance at intermediate temperature 20 °C[J]. Construction and Building Materials, 2022, 323:126568. DOI: 10.1016/j. conbuildmat. 2022. 126568.
- [17] 罗浩原,欧阳铖霏,冷慧康,等.基于临界裂纹尖端位移的沥青胶结料抗疲劳性能评价[J].建筑材料学报,2020,23 (4):969-977.DOI:10.3969/j.issn.1007-9629.2020.04.033.
- [18] GAO Meiyi, ZHANG Haitao, YANG Hongsheng, et al. Research on surface morphology characteristics and microdamage mechanism of asphalt mastic based on charge transfer principle[J]. Construction and Building Materials, 2023,391:131686. DOI:10.1016/j. conbuildmat. 2023. 131686.
- [19] NIAN Tengfei, LI Ping, WEI Xiying, et al. The effect of freeze-thaw cycles on durability properties of SBS-modified bitumen[J]. Construction and Building Materials, 2018, 187:77-88. DOI:10.1016/j. conbuildmat. 2018.07.171.
- [20] 崔亚楠,郭立典,陈东升. SBS 改性沥青的复合老化机理[J]. 建筑材料学报,2020,23(5):1183-1191. DOI:10. 3969/j.issn.1007-9629.2020.05.026.
- [21] 张恒龙,徐国庆,朱崇政,等.长期老化对基质沥青与 SBS 改性沥青化学组成、形貌及流变性能的影响[J].长安大 学学报(自然科学版),2019,39(2):10-18. DOI:10.19721/j. cnki. 1671-8879. 2019.02.002.
- [22] 王永宁,李波,任小遇,等.不同老化时间的 SBS 改性沥青再生红外光谱分析[J]. 材料科学与工程学报,2020,38 (4):643-647. DOI:10.14136/j. cnki. issn1673-2812. 2020. 04. 023.
- [23] 林梅,李萍,念腾飞,等.再生沥青微观结构对流变性能的影响[J].华中科技大学学报(自然科学版),2019,47(6): 121-126. DOI:10.13245/j. hust. 190622.
- [24] 李萍,慕博博,念腾飞,等. 红外光谱(FTIR)和荧光显微镜(FM)表征再生剂在老化沥青中的扩散行为[J]. 材料科 学与工程学报,2022,40(5):767-773,784. DOI:10.14136/j. cnki. issn1673-2812.2022.05.007.

(责任编辑:黄晓楠 英文审校:方德平)

DOI:10.11830/ISSN.1000-5013.202311039

采用层次分析法的香港地区 历史建筑遗产保护价值评价



李子莹,杨晓翔

(云南大学艺术与设计学院,云南昆明 650000)

摘要: 为了更好地研究影响香港地区历史建筑遗产保护价值的因素,采用层次分析法,通过5个准则层和 18个子准则层构建判断矩阵,计算各指标的权重,并以香港大馆为例开展问卷调查。结果表明:准则层的权 重由大到小排序为历史价值、美学价值、社会价值、环境价值、经济价值;子准则层权重的最高值分别为科学考 察价值、对当地旅游业促进性、遗产保护等级评定稀缺性、结构保存完整性、组成城市景观;香港大馆的综合得 分为 3.828 9,评级为"良"。

关键词: 历史建筑遗产;保护价值评价;层次分析法;香港地区

中图分类号: TU 201.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2024)04-0487-07

Evaluation of Conservation Value of Historical Building Heritage in Hong Kong Region Using Analytic Hierarchy Process

LI Ziying, YANG Xiaoxiang

(College of Art and Design, Yunnan University, Kunming 650000, China)

Abstract: In order to study the factors affecting the conservation value of historic building heritage in Hong Kong Region, a analytic hierarchy process is used to construct a judgement matrix through 5 criterion levels and 18 sub-criterion levels, to calculate the weights of the indicators, and to carry out a questionnaire survey taking Hong Kong Pavilion as an example. The results show that the weights of the criterion layers in descending order are historical value, aesthetic value, social value, environmental value, economic value. The highest values of the weights of the sub-criterion layers are scientific investigation value, the promotion of the local tourism industry, the scarcity of the heritage conservation level assessment, the integrity of the structural preservation, and the composition of the cityscape. The comprehensive score of Hong Kong Pavilion is 3.828 9, and it is rated as "good".

Keywords: historical building heritage; conservation value evaluation; analytic hierarchy process; Hong Kong Region

在开埠一百多年里,香港在社会发展、生活习惯、建筑风格等方面都展现了中西方文化的交融,形成 了独特的港式文化和历史建筑。香港拥有众多建于1950年前的历史建筑,数量约达8800幢。这些历 史建筑融合了中外建筑艺术的精华,创造出独特的本地文化归属感,成为香港人文化身份和集体记忆的 重要组成部分。

收稿日期: 2023-11-29

通信作者: 杨晓翔(1967-),男,教授,主要从事民族民居环境发展、地域文化与空间设计的研究。E-mail:yxx67831@ qq. com。

回归后,香港注重城市发展与更新。然而,在这一过程中,不可避免地出现经济发展与文化保护之间的矛盾。尽管香港特区政府实施了一系列文物保护政策和活化举措,但保护效果甚微,这主要是因为香港本土文化的保护往往只关注经济效益,忽视文化保护的意义和精神。例如,利东街项目在重新包装旧式街道并增加额外经济载体的同时,忽略了保留利东街的本土文化和时代特色^[1]。因此,保护香港的历史建筑势在必行,深入挖掘建筑遗产的保护价值可以为今后的保护和活化工作提供指导。

近年来,针对香港地区的历史建筑,许多学者从不同角度进行了深入的探讨^[2-7]。当前的研究大多 集中于香港遗产保护案例与保育活化方式的分析,但因局限于单个遗产案例的保护价值分析,缺乏了从 宏观整体角度出发的建筑遗产价值评估。基于此,本文采用层次分析法(AHP)对香港地区历史建筑遗 产保护价值进行评价。

1 研究方法与路径

过去几十年,香港的遗产保护工作取得了一定进展。香港特区政府对全港历史建筑进行了普查与 记录,考察范围涵盖了香港岛、九龙、新界和离岛4个区域。随后,香港特区政府对所有历史建筑物进行 了三级评级,确定了1444幢具有较高价值的建筑遗产,其中,132幢为法定古迹。这些建筑物凝结了民 众的记忆,见证了香港的历史,但目前面临着破败、倒塌和淘汰的威胁。

1.1 价值评价指标

在使用层次分析法时,评价指标的合理性对研究结果的客观性和可信度至关重要。香港地区历史 建筑遗产保护价值评价指标,如图1所示。



图 1 香港地区历史建筑遗产保护价值评价指标

Fig. 1 Evaluation indicators of conservation value of historical building heritage in Hong Kong Region 评价指标主要基于以下 5 个方面。

1) 国际古迹遗址理事会(ICOMOS)制定的历史建筑保护的评价标准,包括历史价值、美学价值、技术价值、社会价值和可持续价值等,这些标准被用作保护文化遗产的指导,也适用于历史建筑的评估。

2) 香港古物古迹办事处的历史建筑等级评定标准。

- 3) 国内外历史建筑评估体系和学术论文。
- 4) 实地调查部分香港建筑遗产。
- 5) 咨询相关专家意见。

各评价指标遵循内容相互独立、互不重叠、涵盖广泛的原则,综合分析香港历史建筑在社会、经济、 历史、美学和环境等方面的价值,以此构建香港地区历史建筑遗产保护价值评价 AHP 模型。

1.2 历史建筑遗产保护价值评价体系的构建

将层次分析法用于香港地区历史建筑遗产保护价值评价中,从历史建筑的社会价值、经济价值、历
史价值、美学价值和环境价值5个方面进行综合考虑,确定香港地区历史建筑遗产保护价值评价AHP 模型(图2)。该模型由目标层(O)、准则层(A~E)和子准则层(A1~A3,B4~B6,C7~C11,D12~D15, E16~E18)组成。



图 2 香港地区历史建筑遗产保护价值评价 AHP 模型

Fig. 2 AHP model of evaluation of conservation value of historical building heritage in Hong Kong Region

1.3 评价指标的相关运算过程

1) AHP 模型的构建。基于层次分析法构建合理的判断矩阵,并邀请 15 位专家对同一层次中各评价指标进行比较赋值,采用 1~9 级标度法表明各评价指标之间相互重要程度,这种主观赋权法在评价 过程中可以采用专家的知识和经验^[8],同时通过群体决策来引导评价结果,从而减少个人极端偏好的影响,增加评价的客观性和准确性,提高评价结果的可信度。

2) 判断矩阵的构建。

a) 假设基于 N 个历史建筑评价指标来构建历史建筑评价体系。

b) 对 15 位专家随机编号为 P_1, P_2, \dots, P_{15} ,并获取专家判断评分,将其作为历史建筑遗产价值评价的结果。

c)根据专家个体的判断,对历史建筑遗产价值评价指标进行赋权。每位专家独立对比指标的重要性,并构建判断矩阵^[9]。

3) 几何平均算法。

a) 计算各层标度乘积 M_i,有

$$M_i = \prod_{j=1}^m b_{i,j} \,. \tag{1}$$

式(1)中:b_{i,j}为第*i*行第*j*列中的需求指标;m为需求指标量。

b) 判断各层标度乘积几何平均值 a_i,有

$$a_i = \sqrt[m]{M_i} \,. \tag{2}$$

c) 计算权重 W_i,有

$$W_i = a_i / \sum_{i=1}^m a_i \, . \tag{3}$$

d) 计算最大特征根λ_{max},有

$$\lambda_{\max} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{B_{W_i}}{W_i} \,. \tag{4}$$

式(4)中: B_w 为向量 B_w 第i个分量;n为阶数。

e)结果一致性检验,有

$$CI = \frac{\lambda_{max} - n}{n - 1},$$
(5)

$$CR = \frac{CI}{RI}$$
(6)

式(5),(6)中:CI为计算一致性指标;RI为平均随机一致性指标;CR为一致性比值,当CR≤0.1时,一

致性检验通过,当CR>0.1时,则未通过,说明判断矩阵存在逻辑错误,需调整后再次进行计算。

平均随机一致性指标,如表1所示。

	表 1	平均随机-	-致性指标
--	-----	-------	-------

Tab. 1 Average random consensus indexes

指标 -					п				
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
RI	0	0	0.52	0.89	1.12	1.26	1.36	1.41	1.46

2 案例研究

2.1 调研分析

香港原中区警署建筑群(香港大馆)不仅具有历史沿革^[10],而且通过建筑遗产的活化,可以增加城市的文化魅力,并创造社会价值和经济效益。因此,将香港大馆作为典型性的历史建筑遗产保护价值评价体系的研究对象。

在日常生活中,香港大馆积极利用检阅广场、洗衣厂石阶等公共空间(图 3),将其打造成文化活动 场所,为外来游客和本地居民提供文化体验服务,如午间演出、周末电影、戏剧等,促进了文化交流和社 区参与。此外,香港大馆积极承担着提升市民遗产保护意识的任务,通过文化古迹展览、"大馆对谈"讲 座、古迹教育剧场等方式,让市民亲身体验和参与香港的传统文化,加深对遗产保护的理解。



图 3 香港大馆公共空间 Fig. 3 Public space of Hong Kong Pavilion

2.2 判断矩阵

准则层指标判断矩阵为Ao,即

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{O}} = \begin{bmatrix} 1,\,000 & 2,\,361 & 0,\,230 & 0,\,672 & 1,\,366 \\ 0,\,423 & 1,\,000 & 0,\,233 & 0,\,458 & 0,\,376 \\ 4,\,342 & 4,\,289 & 1,\,000 & 0,\,918 & 2,\,141 \\ 1,\,489 & 2,\,182 & 1,\,089 & 1,\,000 & 4,\,274 \\ 0,\,732 & 2,\,657 & 0,\,467 & 0,\,234 & 1,\,000 \end{bmatrix}.$$

社会价值和经济价值的判断矩阵 A_A, A_B 分别为

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{A}} = \begin{bmatrix} 1.\ 000 & 2.\ 667 & 2.\ 248 \\ 0.\ 375 & 1.\ 000 & 0.\ 867 \\ 0.\ 445 & 1.\ 153 & 1.\ 000 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{A}_{\mathrm{B}} = \begin{bmatrix} 1.\ 000 & 1.\ 067 & 1.\ 718 \\ 0.\ 937 & 1.\ 000 & 1.\ 070 \\ 0.\ 582 & 0.\ 935 & 1.\ 000 \end{bmatrix}.$$

历史价值的判断矩阵 Ac 为

$$\boldsymbol{A}_{\rm C} = \begin{bmatrix} 1.000 & 0.400 & 3.433 & 2.895 & 1.366 \\ 2.500 & 1.000 & 2.833 & 2.325 & 1.667 \\ 0.291 & 0.353 & 1.000 & 2.167 & 0.533 \\ 0.345 & 0.430 & 0.461 & 1.000 & 0.400 \\ 0.500 & 0.600 & 1.876 & 2.500 & 1.000 \end{bmatrix}.$$

美学价值和环境价值的判断矩阵 AD, AE 分别为

	[1.000	1.905	2.283	ן 953 1.		=1 000	1 057	1 0007
	0.525	1.000	2.639	2.262		1.000	1.057	1.938
$A_{\rm D} =$	0 120	0.270	1 000	0 400	, $A_{\rm E} =$	0.946	1.000	1.379 。
	0.430	0.379	1.000	0.400		LO.516	0.725	1.000
	LO.512	0.442	2.500	1.000				

2.3 权重结果分析

根据层次分析法,可得各层次指标权重,如表2所示。表2中:W。为准则层权重;W。为子准则层权 重;W、为总权重。

	Tab. 2 Indicator weight of each level								
目标层	准则层	$m{W}_{ m c}$	子准则层	${W}_{ m s}$	$oldsymbol{W}_{ ext{t}}$	总排序			
			A1	0.169 2	0.025 2	17			
	А	0.148 9	A2	0.446 9	0.066 5	5			
_			A3	0.383 9	0.057 2	7			
			B4	0.402 0	0.031 4	14			
	В	0.078 2	B5	0.329 1	0.025 7	16			
			B6	0.268 8	0.021 0	18			
			C7	0.124 0	0.043 0	11			
		0.346 4	C8	0.094 9	0.032 8	13			
0	С		С9	0.264 4	0.091 6	3			
0			C10	0.357 4	0.123 8	1			
			C11	0.159 2	0.055 2	8			
			D12	0.383 6	0.114 5	2			
	D	0.208.6	D13	0.299 2	0.089 3	4			
	D	0.298 0	D14	0.117 2	0.034 9	12			
			D15	0.200 1	0.059 7	6			
			E16	0.411 6	0.052 6	9			
	Е	0.127 9	E17	0.354 4	0.045 3	10			
			E18	0.234 0	0.029 9	15			

	表	2	谷唐	丟り	(子	旨衣	下权	里			
~	т	1.				1	c		1	1	

由表2可知:准则层中历史价值的权重最高(0.3464);美学价值的权重相对较高(0.2986);社会价值(0.1489)和环境价值(0.1279)相近;经济价值较低(0.0782)。这说明在历史建筑遗产的保护价值评价体系的大类因素中,历史价值和美学价值比社会价值、环境价值和经济价值更为重要。

根据总权重比较,可得子准则层中遗产保护等级评定稀缺性、结构保存完整性和建造年份久远性的 总权重位于前三位,分别为 0.123 8,0.114 5,0.091 6。由此可知,准则层和子准则层中的排序情况基 本一致,这反映了该研究在历史建筑遗产权重分配方面的科学性^[9]。

 1) 评价指标分类。根据总权重将 18 个评价指标划分为 3 类,其中,总权重≥0.080 0 为重要指标, 总权重为 0.040 0~0.080 0 为次重要指标,总权重≤0.040 0 为一般指标。

由表 2 及相关计算可知:重要指标有 4 项,按降序排列的总权重依次为遗产保护等级评定稀缺性、 结构保存完整性、建造年份久远性、设计风格典型性,4 项总权重为 0.419 2;次重要因子有 7 项,按降序 排列的总权重依次为科学考察价值、建造工艺地域性、教育功能可行性、构建城市格局、著名人物与历史 事件知名度、组成城市景观、与城市发展关联性,7 项总权重为 0.379 5;一般因子有 7 项,按降序排列的 总权重依次为空间功能丰富性、外来文化影响性、对当地旅游业促进性、与城市特色山水环境的关联、自 身可利用性价值、公众参与广泛性、促进产业升级价值,7 项总权重为 0.200 9。

2)调查问卷结果。为了更好地分析香港历史建筑保护的价值与成果,选择香港大馆作为调研地点,并以其游客为调研对象。采用纸质问卷和网络问卷相结合的方式,让游客对历史建筑遗产中的各个指标进行评分。问卷采用李克特量表法,其中,1~5的评分标准分别对应很差、较差、一般、较好、很好5个等级。随机发放120份调查问卷,并统计各指标的评分(C_i,平均值)。

香港大馆指标得分(S_i)和综合得分(S)的计算公式分别为

$$S_{I} = C_{i} \times W_{i}, \qquad (7)$$

$$S = \sum_{i}^{n} (C_{i} \times W_{i})_{\circ}$$
(8)

使用差值法将综合得分划分为优(4 \leq S<5)、良(3 \leq S<4)、中(2 \leq S<3)、差(1 \leq S<2)4个等级。

经统计,最终收到 111 份有效问卷,有效率为 92.5%;参观的本地居民和外来游客的比例分别为 53.12%,46.88%;中国国籍游客和外国国籍游客的比例分别为 90%,10%;问卷人群基数中占比最多 的年龄段为 25~30岁。使用 SPSS 统计软件对 111 份有效问卷进行信度分析,其 Cronbach' Alpha 值 为 0.932 0,高于 0.800 0,信度良好,表明研究数据具有良好的可靠性。

香港大馆的评分和综合得分,如表 3 所示。表 3 中:C。为准则层评价指标的评分;C。为子准则层评价指标的评分。

表 3	香港大馆的评分和综合得分

目标层	准则层	$C_{ m c}$	子准则层	$oldsymbol{W}_{ ext{t}}$	$C_{\rm s}$	S_{I}	S
			A1	0.025 2	3.483 3	0.087 8	
	А	3.696 1	A2	0.066 5	3.875 2	0.257 7	
			A3	0.057 2	3.541 7	0.202 6	
			B4	0.031 4	3.025 0	0.094 9	-
	В	3.583 7	B5	0.025 7	3.741 7	0.096 2	
			B6	0.021 0	3.525 0	0.074 0	
		4.021 3	C7	0.043 0	3.775 0	0.162 3	-
			C8	0.032 8	3.783 3	0.123 1	3.804 2
0	С		C9	0.091 6	4.016 7	0.367 9	
0			C10	0.123 8	4.091 7	0.506 6	
			C11	0.055 2	3.658 4	0.201 9	
			D12	0.114 5	4.241 7	0.485 7	_
	D		D13	0.089 3	3.816 7	0.340 8	
	D	3.843 5	D14	0.034 9	3.658 5	0.127 7	
			D15	0.059 7	3.858 3	0.230 3	-
		3.627 4	E16	0.052 6	3.458 3	0.181 9	
	Е		E17	0.045 3	3.608 4	0.163 4	
			E18	0.029 9	3.325 0	0.099 4	

Tab. 3 Score an	l comprehensive	score of	Hong	Kong	Pavilion
-----------------	-----------------	----------	------	------	----------

由表3可得以下6个结论。

1) 香港大馆的综合得分为 3.804 2,评级为"良",这表明游客对香港大馆的历史建筑保护与活化成 果感觉良好。

2) 社会价值的评分为 3.696 1,评级为"良",从子准则层面来看,科学考察价值明显高于其他指标, 这是因为香港大馆承载了香港历史上的重要事件和社会变迁,见证了香港从殖民地时期到现代社会的 发展,这对于历史学、文化研究和社会科学领域的研究人员来说具有重要的研究价值。因此,在后续工 作中,香港大馆可与其他历史建筑合作,举办城市更新、文化遗产相关的主题活动,共同推广遗产保护及 活化意识。此外,需进一步加强当地公众对香港大馆的广泛关注,以增强当代人保护历史遗产的意识。

3) 经济价值的评分为 3.583 7, 评级为"良", 香港大馆的经济效益较低。该场所提供精品餐饮、礼 品售卖等文化消费, 且合作对象多为政府、公益组织, 与商业品牌合作较少, 对社区的经济贡献度较小。

4) 历史价值的评分为 4.021 3,评级为"优",遗产保护等级评定稀缺性的评分明显高于其他指标, 说明香港大馆具有较高的古迹价值^[11],主要体现在中区警署主楼、古物古迹办公室、法院大楼等建筑代 表了香港历史上的不同建筑风格和时期,例如,英国殖民地建筑风格和中西结合的建筑风格。此外,展 馆内部展示了大量的历史资料与场景(铁笼、牢房、囚服等),为游客提供了沉浸式的体验。

5) 美学价值的评分为 3.843 5,评级为"良",从指标层面来看,结构保存完整性评分最高,其次是建造工艺地域性,再次是设计风格典型性和空间功能丰富性。香港大馆的建筑结构保存完好,展示了中西

结合的建筑工艺,但内部的空间功能仍需进一步调整。

6)环境价值的评分为 3. 627 4, 评级为"良", 说明香港大馆虽与城市建设密切相关, 但未充分考虑 到历史建筑的保护和环境整体的协调^[12],其历史风貌和中环地区的商业气息十分矛盾。

3 结束语

运用层次分析法对香港历史建筑遗产的保护价值进行分析,实现多指标要素的定性与定量研究。 以香港大馆为例,将历史建筑遗产价值划分为5个准则层、18个子准则层,并将其划分为3类指标。结 果表明,该建筑保护成果评级为"良",一定程度上反映了香港建筑遗产保护的特点及影响保护价值的4 个重要指标(遗产保护等级评定稀缺性、结构保存完整性、建造年份久远性和设计风格典型性),这表明 大馆建筑具有较高的历史和美学价值。该文构建了较为全面的历史建筑遗产保护评价指标体系,但鉴 于历史建筑评价与保护的动态性和复杂性,目前的研究内容仍存在一定局限性,今后在实践过程中需进 一步调整和优化评价指标,提升研究的科学性与实用性。

参考文献:

- [1] 齐一聪,张兴国,吴悦.基于城市监督的香港文物建筑保育解析:以香港永利街为例[J].规划师,2015,31(4):123-127.
- [2] 梁以华,郑红.楼情:香港 20世纪初唐楼建筑研究及其活化利用设计[J].建筑遗产,2019,14(2):50-58.
- [3] 许月丽,汪涵,刘建麟.居住历史建筑活化中的协同治理:以香港为例[J].建筑遗产,2022,28(4):1-11.
- [4] 郎嵬,李郇,陈婷婷. 从社会因素角度评估香港城市更新模式的可持续性[J]. 国际城市规划,2018,33(6):63-67. DOI:10.22217/upi.2016.144.
- [5] 薛求理,顾艳秋,景祥祜,等.灯塔记忆:探析香港横澜岛灯塔建筑群[J].建筑遗产,2023,29(1):65-75.
- [6] 王珺,周亚琦.香港"活化历史建筑伙伴计划"及其启示[J].规划师,2011,27(4):73-76.
- [7] 齐一聪,张兴国,吴悦.基于香港文物建筑的活化对中国内地的启示[J].中国园林,2015,31(3):110-114.
- [8] 邰惠鑫,杨玉兰,沈黎,等.历史建筑价值评估中的指标权重研究[J].浙江工业大学学报,2021,49(3):300-307. DOI:10.3969/j.issn.1006-4303.2021.03.010.
- [9] 葛天阳,后文君,阳建强.基于 GIS 和 AHP 的历史地段建筑多级综合评价:以南京湖熟古镇核心地段为例[J].现 代城市研究,2017(7):31-38. DOI:10.3969/j.issn.1009-6000.2017.07.005.
- [10] 罗洁梅,简祎,钱怡程,等.城市文化遗产活化中的空间、活动与社会价值:以上海上生新所和香港大馆为例[C]// 2021 中国城市规划年会.北京:中国建筑工业出版社,2021:11.
- [11] 宋刚,杨昌鸣.近现代建筑遗产价值评估体系再研究[J].建筑学报,2013(增刊2):198-201.
- [12] 蒋楠,王建国.近现代建筑遗产保护与再利用综合评价[M].南京:东南大学出版社,2016.

(责任编辑: 钱筠 英文审校: 方德平)

DOI:10.11830/ISSN.1000-5013.202405016

粤港澳大湾区大气碳污协同 减排水平评估



和思楠^{1,2},石龙宇¹

(1. 中国科学院城市环境研究所城市环境与健康重点实验室,福建 厦门 361021;2. 中国科学院大学,北京 100049)

摘要: 采用碳污减排协同水平模型,从粤港澳大湾区全域-城市双维度开展粤港澳大湾区碳污相对减排量测度及协同减排水平测度。结果表明:大湾区城市平均 CO₂ 减排量总体呈现增长趋势,但降碳动力逐年下滑, 而减排力度大;自 2014 年,粤港澳大湾区 81%的城市群碳污协同减排指数渐趋于 1.0,不同地区之间的碳污 协同减排水平整体呈现差异缩小趋势,发达地区的协同减排水平较高。 关键词: 大气环境;可挥发性有机物;协同水平模型;粤港澳大湾区

中图分类号: X 8 文献标志码: A 文章编号: 1000-5013(2024)04-0494-07

Evaluation of Carbon and Pollution Synergy Reduction Levels in Atmosphere in Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area

HE Sinan^{1,2}, SHI Longyu¹

 Key Laboratory of Urban Environment and Health, Institute of Urban Environment, Chinese Academy of Sciences, Xiamen 361021, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: The carbon and pollution reduction synergy level model is adopted to measure the relative carbon and pollution reduction and synergy reduction levels of Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area from regional-city dual-dimensional perspective. The results show that the urban average CO_2 reduction in the Greater Bay Area presents an overall growth trend, but the motivation for carbon reduction has been declining annually, and the reduction effort is strong. Since 2014, carbon and pollution synergy reduction indexes have gradually approached to 1.0 in 81% of the city clusters in Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area, meanwhile, carbon and pollution synergy reduction levels in different regions show a trend of decreasing difference, and the levels are higher in developed areas.

Keywords: atmospheric environment; volatile organic compounds; synergy level model; Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area

协同推进"降碳、减污"是促进人与自然和谐共生的重要内容^[1]。大气污染物与二氧化碳(CO₂)排 放具有同源性和同效性,主要来自于化石燃料的燃烧和利用过程,这是开展减污降碳协同增效工作的基

收稿日期: 2024-05-29

通信作者: 石龙宇(1981-),男,研究员,博士,博士生导师,主要从事减污降碳的研究。E-mail:lyshi@iue.ac.cn。

基金项目: 国家重点研发计划项目(2022YFF1301201)

础。我国挥发性有机物(VOCs)减排与控制研究工作起步较晚,工作进展落后于二氧化硫(SO₂)、氮氧 化物(NO_x)等其他大气污染物的减排与防控。随着一系列政策法规的颁布实施,大气中的 VOCs 被列 入大气环境质量的约束性指标,其污染防治成为我国大气污染控制的关键与重点^[2]。由于跨区域性特 征,粤港澳大湾区(简称大湾区)面临着持续降低 PM_{2.5}浓度和控制臭氧(O₃)污染、实现碳达峰的要求, 测度碳污协同减排水平是环境治理的前提^[3]。

在全球气候变化的背景下,近几年的研究将视角转向减污降碳协同作用领域,已有研究涵盖了协同 理论、减排水平的测度等^[4]。协同作用起源于物理科学,是指两种不同系统同时向更好状态演化的现 象^[5]。文中的协同作用是指不同地区或区域的大气污染控制和碳排放的缓解在一定时期内向较好的状 态发展。当前,国内外学者日益重视大气污染与碳减排的协同治理,对此进行了相关研究^[69]。基于此, 本文从粤港澳大湾区全域-城市双维度分析大气污染物与二氧化碳协同减排水平。

1 研究区域与研究方法

1.1 研究区域

2019 年 2 月印发的《粤港澳大湾区发展规划纲要》指出,港澳大湾区范围是"九市二区",是由广东 省珠江三角洲 9 个城市(广州市、深圳市、佛山市、东莞市、珠海市、惠州市、中山市、江门市、肇庆市)及香 港特别行政区和澳门特别行政区形成的城市群。粤港澳大湾区位于珠江流域中下游,陆域面积约 5.6 万 km²,2020 年末,总人口约 8 617 万人,GDP 超过 11 万亿元,是世界第 4 大湾区^[10]。

1.2 数据来源

1) 多尺度排放清单模型。研究数据来源于多尺度排放清单 模型(http://meicmodel.org.cn)^[11]。采用 ArcGIS 软件的分区 统计功能,批量提取各地级市的排放量平均值。在此之前,为减 小栅格分辨率带来的分区统计误差,将栅格像元大小参数 X,Y 分别缩小 10 倍,并进行重采样操作。

数据处理过程,如图1所示。

2) 经济数据。经济数据来源于各城市统计年鉴(2000-2020年)、中华人民共和国国家统计局(https://data.stats.gov.cn)、香港特别行政区政府统计处(http://www-censtatd-gov-hk-s.w.hqu.edu.cn)及澳门特別行政区政府统计暨普查局(http://www-dsec-gov-mo-s.w.hqu.edu.cn)。

1.3 研究方法

图 1 数据处理过程 Fig. 1 Data processing procedure

采用碳污减排协同水平模型计算大气污染物和二氧化碳的协同减排量相对变化的程度。根据碳污 相对于研究初始期的减排量,测算两者减排量的协同度变化指数,并分析大湾区 9+2 城市群的大气污 染物和二氧化碳协同减排趋势。

1.3.1 相对减污水平的测算 相较于 2000 年,2000-2020 年大湾区 9+2 城市群的 VOCs 相对减排 量为

$$\operatorname{VRR}_{i,t} = \left(\frac{\operatorname{VR}_{i,2000}}{\operatorname{GDP}_{i,2000}} - \frac{\operatorname{VR}_{i,t}}{\operatorname{GDP}_{i,t}}\right) \times \operatorname{GDP}_{i,t} \circ$$
(1)

式(1)中:*i*为城市;*t*为年份;VRR为 VOCs 相对减排量;VR为 VOCs 排放量;GDP 为国内生产总值。 1.3.2 相对降碳水平的测算 为了剔除生产与经营的影响因素,可以得到不同年份、各城市 CO₂ 相对 减排量为

$$\operatorname{CRR}_{i,t} = \left(\frac{\operatorname{CR}_{i,2000}}{\operatorname{GDP}_{i,2000}} - \frac{\operatorname{CR}_{i,t}}{\operatorname{GDP}_{i,t}}\right) \times \operatorname{GDP}_{i,t} \, o \tag{2}$$

式(2)中:CRR为CO2相对减排量;CR为CO2排放量。

1.3.3 减污降碳协同水平的测算 根据文献[12]的方法,以相对减排量的增长率为基础,构建 CO₂ 与 VOCs 的协同减排指数,该指数越大,表明 CO₂ 与 VOCs 的协同减排水平越高。协同减排指数为



V

$$\gamma_{i,t} = 1 - \frac{1}{2} \left\{ \frac{\operatorname{VRRG}_{i,t} - \overline{\operatorname{VRRG}}_{i}}{\sqrt{\frac{1}{T} \sum_{i=1}^{t=T} (\operatorname{VRRG}_{i,t} - \overline{\operatorname{VRRG}}_{i})^{2}}} - \frac{\operatorname{CRRG}_{i,t} - \overline{\operatorname{CRRG}}_{i}}{\sqrt{\frac{1}{T} \sum_{i=1}^{t=T} (\operatorname{CRRG}_{i,t} - \overline{\operatorname{CRRG}}_{i})^{2}}} \right\}^{2}$$
(3)

$$RRG_{i,t} = \frac{VRR_{i,t+1} - VRR_{i,t}}{VRR_{i,t}}$$
(4)

$$\overline{\text{VRRG}}_{i} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{t=T} \text{VRRG}_{i,t} \quad .$$
(5)

$$CRRG_{i,t} = \frac{CRR_{i,t+1} - CRR_{i,t}}{CRR_{i,t}}$$
(6)

$$\overline{\text{CRRG}}_{i} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{t=T} \text{CRRG}_{i,t} \quad .$$
(7)

式(3)中:γ为CO₂与VOCs的协同减排指数;VRRG为VOCs相对减排量增长率;VRRG为VOCs相 对减排量增长率的年平均值;CRRG为CO₂相对减排量增长率;CRRG为CO₂相对减排量增长率的年 平均值^[13]。

经计算整理,可以得到 2000-2020 年大湾区 9+2 城市群 CO₂ 与 VOCs 协同减排指数的平衡面板 数据集。

2 粤港澳大湾区减污降碳现状分析

2.1 粤港澳大湾区降碳水平

2000-2020年,大湾区 CO₂ 排放量,如图 2 所示。图 2 中: δ_{CR} 为 CO₂ 排放量年增长率。由图 2 可 知:2000-2011年,CO₂ 排放量变化呈逐年上升趋势,由 8 443.3万t • a⁻¹上升至 24 345.6万t • a⁻¹, CO₂ 排放量增加 15 902.3万t • a⁻¹;2012-2020年,整体则呈波动下降趋势,CO₂ 排放量在经历了 2015年,2017年两次波动起伏后,2020年,下降至 21 615.5万t • a⁻¹,相较于峰值,CO₂ 排放量下降了 2 730.1万t • a⁻¹。

2001-2020年,大湾区城市平均 CO₂相对减排量(CRR_{ave}),如图 3 所示。由图 3 及相关计算可知: 大湾区城市平均 CO₂相对减排量呈现逐年上升趋势,减排力度较大;2020年,大湾区城市平均 CO₂相 对减排量达到 542.21万t,是 2001年 60.87万t的 8.91倍,减排效果较为显著;年平均增长速率高达 14.58%,呈持续上升趋势;大湾区城市平均 CO₂相对减排量在 2012年首次突破 300万t,至 2013年, 再次突破 400万t;除了 2002年(CRRG=-2.86%)、2004年(CRRG=-13.85%)、2005年(CRRG= -16.85%)和 2011年(CRRG=-0.99%)之外,大湾区城市平均 CO₂相对减排量增长率均为正值; 2006年,城市平均 CO₂相对减排量增长率超过 80.16%,大湾区城市平均 CO₂相对减排量快速上升,但 不同地区存在较大差异;2020年,大湾区城市平均 CO₂相对减排量的标准差和变异系数的绝对值仍然 很高,分别为 584.79万t,1.08。



https://hdxb. hqu. edu. cn/

2.2 粤港澳大湾区减污水平

2000-2020年,大湾区 VOCs 排放量,如图 4 所示。图 4 中:δvR为 VOCs 排放量的年增长率。

由图 4 可知:2000-2015 年,VOCs 排放量变化呈上升趋势,由 54.1 万 t • a⁻¹上升至 113.7 万 t • a⁻¹,VOCs 排放量增加 59.6 万 t • a⁻¹;2016-2020 年,则呈波动下降趋势,VOCs 排放量在经历了 2018 年的波动起伏后,2020 年下降至 104.8 万 t • a⁻¹,相较于峰值,VOCs 排放量下降了 8.8 万 t • a⁻¹。

2001-2020年,大湾区城市平均 VOCs 相对减排量,如图 5 所示。由图 5 及相关计算可知:大湾区 城市平均 VOCs 相对减排量呈现缓慢上升的趋势,但减排力度逐年减弱,城市之间 VOCs 相对减排效 果存在较大差距。大湾区城市平均 VOCs 相对减排量变化总体上可分为以下 3 个时期。

1) 2001-2005年,大湾区城市平均 VOCs 相对减排量表现出强劲的增长势头,从 2001年的 0.23 万 t 增加至 2005年的 1.13万 t;此研究期间,大湾区城市平均 VOCs 相对减排量增加了 1.08万 t,年平 均增速高达 51.94%。

2) 2005-2012年,大湾区城市平均 VOCs 相对减排量总体呈上升趋势,减排动力逐渐减缓。相较于 2008年,2009年大湾区城市平均 VOCs 相对减排量增长仅 0.13万 t。

3) 2012-2020年,大湾区城市平均 VOCs 相对减排效果和减排动力进入瓶颈期,急需技术突破。



in Greater Bay Area

3 粤港澳大湾区减污降碳协同水平

3.1 粤港澳大湾区碳污协同程度

2000-2020年,大湾区 CO₂ 与 VOCs 协同减排情况,如图 6 所示。图 6 中:η 为排放量变化率。 由图 6 可知:大湾区 CO₂ 和 VOCs 减排总体呈现正协同效应;2005-2010 年交通和居民减排、 2015-2020年交通和工业减排均呈现负效应;交通部门自 2005 年起 VOCs 的治理有显著成效,2005-2010年,2010-2015年,2015-2020年 VOCs 的排放量变化率逐期增大,分别为-16.94%,-18.28% 和-31.17%,;2010-2015年的 CO₂ 减排情况较差,虽然电力部门的 CO₂ 排放量变化率为-5.88%, 但 VOCs 排放总体呈增长态势,小幅增长 0.3%。





图 6 大湾区 CO₂ 与 VOCs 协同减排情况

Fig. 6 Synergy reduction situation of CO₂ and VOCs in Greater Bay Area

3.2 粤港澳大湾区全域碳污协同减排水平

基于 CO₂ 减排与 VOCs 减污分析,测算大湾区碳污协同减排水平。2002-2020 年,大湾区 CO₂ 与 VOCs 协同减排水平,如图 7 所示。图 7 中:γ_{ave,11}为大湾区协同减排指数(平均值)。由图 7 可知:大湾 区 CO₂ 和 VOCs 协同减排水平指数均大于-1.0 且小于 1.0,协同减排水平呈现微下降趋势,这说明大 湾区碳污协同减排存在压力,需要深入研究其影响因素,促进协同减排水平的提高。

考虑到香港特别行政区和澳门特别行政区与广东 9 个城市(广东 9 城)的碳污减排控制可能存在差 异,故测算 2002-2020 年广东 9 城 CO₂ 与 VOCs 协同减排指数,结果如图 8 所示。图 8 中:γ_{ave}.9 为广东 9 城协同减排指数(平均值)。由图 8 可知:与大湾区全域整体协同指数不同的是,除了 2009 年、2010 年 和 2017 年外,碳污协同减排水平指数均大于 0 且小于 1.0,具有更好的减排协同性;广东 9 城的碳污协 同减排水平逐年增长,近年来协同减排程度处于正向协同,即广东 9 城碳污减排具有内在的一致性。



图 7 大湾区 CO₂ 与 VOCs 协同减排水平 Fig. 7 Synergy reduction levels of CO₂ and VOCs in Greater Bay Area



图 8 广东 9 城 CO₂ 与 VOCs 协同减排水平 Fig. 8 Synergy reduction levels of CO₂ and VOCs in Guangdong 9 cities

3.3 城市碳污协同减排水平

2002-2020年,大湾区 9+2 城市群减污降碳协同指数,如图 9 所示。由图 9 可得减排水平呈现以下 3 个阶段的特征。

1) 2002-2008年,大湾区的协同减排指数并不稳定,而深圳市、澳门特别行政区的 CO₂ 与 VOCs 协同减排指数于 2008年都达到了 0.93 以上,深圳市甚至达到 1.0,这些城市的 VOCs 与 CO₂ 减排的协同程度非常高,即 VOCs 的减排能够有效地促进 CO₂ 的减排。肇庆市协同减排指数变化最大,甚至增长了 2.76。

2) 2008-2014 年,除广州市,大部分城市的 CO₂ 与 VOCs 协同减排指数保持正数或由负转正。 2014 年末,协同减排指数均处于较高水平,大湾区 VOCs 减排与 CO₂ 减排相互促进。特别地,珠海市 在此期间协同减排指数由负转正,呈现出协同治理效果具有滞后性的特征。

3) 2014-2020 年,81%的城市群 VOCs 与 CO₂ 协同减排指数保持较高水平,且趋于 1.0,显示 CO₂ 减排与 VOCs 减排相互促进。然而,大部分地区的协同动力不足,协同减排指数甚至呈现下降趋势。





4 讨论

以往有少量减污降碳协同控制的研究,但关于 VOCs 的研究刚刚起步,分别从粤港澳大湾区全域-城市尺度分析大气污染物与二氧化碳协同减排水平。测度出大湾区二氧化碳和大气污染物排放量变化 呈现3个时期的特征。大湾区9+2城市群 CO2减排量逐年增加,2020年,CO2相对减排量较大,但减 排动力逐年下滑;而城市平均 VOCs 排放量于 2016年出现波动下降,相对减排量呈缓慢上升趋势,减排 力度大。大湾区大气污染物的减排可以有效降低 CO2 的排放,在大湾区全域尺度上,自 2014年,81% 的城市群 VOCs 与 CO₂ 协同减排指数渐趋于 1.0;在城市尺度上,不同地区之间的碳污协同减排水平整体呈现差异缩小趋势,发达地区的协同减排水平较高。

结合《中华人民共和国气候变化初始国家信息通报》及相关研究归纳出碳排放和大气污染物排放的 影响因素主要为能源消费量、能源强度、经济发展、人口因素、经济结构、能源结构、工业化水平及生活水 平和生活方式等^[14-15]。特别地,实现碳减排的重要途径之一是生产结构的升级,包括促进技术进步、优 化资源配置及推动环保产业的发展。因此,政府和企业需要共同努力,增加对产业结构升级的支持和投 入,以实现碳减排目标。

参考文献:

- [1] 习近平.努力建设人与自然和谐共生的现代化[J]. 奋斗,2022(11):6-11. DOI:10.16634/j. cnki. cn23-1001/d. 2022. 11.010.
- [2] 江梅,邹兰,李晓倩,等.我国挥发性有机物定义和控制指标的探讨[J].环境科学,2015,36(9):3522-3532. DOI:10. 13227/j. hjkx. 2015.09.051.
- [3] 张炽辉,蔡卓弟,黄冰,等. 粤港澳大湾区典型区域 VOCs 污染整治的探索与展望[J]. 环境与发展,2019,31(5):60-62. DOI:10.16647/j. cnki. cn15-1369/X. 2019. 05. 036.
- [4] 唐湘博,张野,曹利珍,等.中国减污降碳协同效应的时空特征及其影响机制分析[J].环境科学研究,2022,35(10): 2252-2263. DOI:10.13198/j.issn.1001-6929.2022.08.10.
- [5] 白列湖.协同论与管理协同理论[J].甘肃社会科学,2007(5):228-230. DOI:10.15891/j. cnki. cn62-1093/c. 2007. 05.065.
- [6] OKORN K, JIMENEZ A, COLLIER-OXANDALE A, et al. Characterizing methane and total non-methane hydrocarbon levels in Los Angeles communities with oil and gas facilities using air quality monitors[J]. Science of the Total Environment, 2021, 777;146194. DOI:10.1016/j. scitotenv. 2021.146194.
- [7] GUAN Yang,XIAO Yang,RONG Bing, et al. Heterogeneity and typology of the city-level synergy between CO₂ emission, PM_{2.5}, and ozone pollution in China[J]. Journal of Cleaner Production, 2023, 405;136871. DOI:10.1016/j. jclepro. 2023. 136871.
- [8] XUE Wenbo, LEI Yu, LIU Xin, et al. Synergistic assessment of air pollution and carbon emissions from the economic perspective in China[J]. Science of the Total Environment, 2023, 858: 159736. DOI: 10. 1016/j. scitotenv. 2022. 159736.
- [9] YI Hongru, ZHAO Laijun, QIAN Ying, et al. How to achieve synergy between carbon dioxide mitigation and air pollution control? Evidence from China[J]. Sustainable Cities and Society, 2022, 78:103609. DOI:10.1016/j. scs. 2021. 103609.
- [10] 李晓江,何舸,罗彦,等. 粤港澳大湾区碳排放空间特征与碳中和策略[J]. 城市规划学刊,2022(1):27-34. DOI:10. 16361/j. upf. 202201004.
- [11] ZHENG Bo, TONG Dan, LI Meng, et al. Trends in China's anthropogenic emissions since 2010 as the consequence of clean air actions[J]. Atmospheric Chemistry & Physics Discussions, 2018, 18(19):14095-14111. DOI:10.5194/ acp-18-14095-2018.
- [12] CERQUEIRA P A, MARTINS R. Measuring the determinants of business cycle synchronization using a panel approach[J]. Economics Letters, 2009, 102(2):106-108. DOI:10.1016/j. econlet. 2008. 11.016.
- [13] 叶芳羽,单汨源,李勇,等.碳排放权交易政策的减污降碳协同效应评估[J].湖南大学学报(社会科学版),2022,36 (2):43-50. DOI:10.16339/j. cnki. hdxbskb. 2022.02.007.
- [14] ZHENG Jiali, MI Zhifu, COFFMAN D M, et al. Regional development and carbon emissions in China[J]. Energy Economics, 2019, 81: 25-36.
- [15] CHEN Jiandong, WANG Ping, CUI Lianbiao, et al. Decomposition and decoupling analysis of CO₂ emissions in OECD[J]. Applied Energy, 2018, 231:937-950. DOI:10.1016/j. apenergy. 2018.09.179.

(责任编辑: 钱筠 英文审校: 刘源岗)

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202403009



艾比湖流域 LUCC 驱动的碳储量 时空动态特征与多情景预测

布威阿依谢姆·吐合提^{1,2},阿布都热合曼·哈力克^{1,2,3}, 姚凯旋^{1,2},魏倩倩^{1,2},姚磊^{1,2},唐华^{1,2},罗健梅^{1,2},段越帆^{1,2}

(1. 新疆大学 地理与遥感科学学院,新疆 乌鲁木齐 830017;
2. 新疆大学 绿洲生态学新疆重点实验室,新疆 乌鲁木齐 830017;
3. 新疆大学 智慧城市与环境建模重点实验室,新疆 乌鲁木齐 830017)

摘要: 运用一个集成 GMOP-PLUS-InVEST 模型的框架,动态分析艾比湖流域土地利用/土地覆被变化 (LUCC)和碳储量的变化,并提供 2030 年 3 种可代替发展方案:自然发展情景(情形 S1)、经济快速发展情景 (情形 S2)、经济和生态平衡发展情景(情形 S3)。研究结果表明:1990-2020 年间,耕地、建设用地和草地增加,林地、未利用地和水体则减少;在 LUCC 驱动下,过去 30 年间,总碳储量呈"增-减-增-减"的交替波动状态,整体增加了 9.79×10⁶ t;与延续历史发展和经济快速发展相比,情景 S3 碳储量及其经济价值最为缓减,因为该情景对区域森林和草地资源的干扰有最大限制。

关键词:碳储量;耦合模型;土地利用/土地覆被变化;情景模拟;艾比湖流域
 中图分类号: S718.5;F301.2
 文献标志码: A 文章编号: 1000-5013(2024)04-0501-13

Spatio-Temporal Dynamics Characteristic and Multi-Scenario Prediction of Carbon Storage Driven by LUCC in Ebinur Lake Basin

BUWEIAYXIEMU • Tuheti^{1,2}, ABUDUREHEMAN • Halike^{1,2,3}, YAO Kaixuan^{1,2}, WEI Qianqian^{1,2}, YAO Lei^{1,2}, TANG Hua^{1,2}, LUO Jianmei^{1,2}, DUAN Yuefan^{1,2}

(1. College of Geography and Remote Sensing Sciences, Xinjiang University, Urumqi 830017, China;

2. Xinjiang Key Laboratory of Oasis Ecology, Xinjiang University, Urumqi 830017, China;

3. Key Laboratory of Smart City and Environment Modelling, Xinjiang University, Urumqi 830017, China)

Abstract: A framework of the integrated GMOP-PLUS-InVEST model is used to dynamically analyze the land use/land cover change (LUCC) and carbon stock change in the Ebinur Lake Basin, and three alternative development plans in 2030 are provided: the scenario of natural development (scenario S1), the scenario of rapid economic development (scenario S2), and the scenario of economic and ecological balanced development (scenario S3). The research results show, between 1990 and 2020, the cultivated land, construction land and

收稿日期: 2024-03-09

通信作者: 阿布都热合曼・哈力克(1967-),教授,博士,主要从事干旱区水土资源与环境管理的研究。E-mail:ah@xju.edu.cn。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(42161049, 41761019, 41061052)

grassland increase, while wood land, unused land and water bodies decrease. Driven by LUCC, the total carbon storage has shown an alternating fluctuation state of "increase-decrease-increase-decrease" with a total increase of 9.79×10^6 t in the past 30 years. Compared with the continuation of historical development and rapid economic growth, the carbon storage and its economic value of scenario S3 present the most gradual reduction because the disturbance of the regional forest and grassland resources in this scenario is most limited.

Keywords: carbon storage; coupling model; land use/land cover change; scenario simulation; Ebinur Lake Basin

化石燃料的大量排放^[1]造成全球二氧化碳质量浓度激增^[2-3],破坏了全球碳循环,进而导致全球变 暖。1992年,国际社会通过碳排放管理谈判应对气候变化。2020年,中国在联合国第75届会议上承诺 了"双碳"目标。碳减排的关键是利用陆地碳汇^[4],受土地利用/土地覆被变化(LUCC)对各土地碳封存 能力变化的影响^[5-6],"双碳"目标面临着巨大的挑战,经济发展使一些地区开始出现碳流失问题^[7-10]。 不同土地类型具有不同的固碳能力,正确的土地管理可补偿碳损失^[11]。因此,理解 LUCC 对碳储量的 影响及优化土地使用对可持续发展至关重要。

当前,研究普遍采用模型估算法评估 LUCC 对陆地碳储量的影响。InVEST 模型因其速度快、直观且数据需求较少的优点,在多个尺度上被广泛应用,包括国家^[12]、山区^[13]、流域^[14]、沿海湿地^[15]及各级行政区域,如省^[8]和县^[16]等。土地利用情景模拟方法是帮助决策者量化生态系统服务对社会经济和政策响应的重要方法^[17-18]。在土地利用模拟方面,近年来,PLUS 模型因其在斑块级变化模拟的高精度得到学者们的青睐,其精度超过了其他模型,如 CA-Markov 模型和 FLUS 模型等^[19],更适合大尺度研究。随着研究的深入,结合土地利用模拟与 InVEST 模型评估碳储量的方法已成为新趋势^[20]。目前,为了解决单一模型在捕捉 LUCC 复杂性方面的不足,采用多模型耦合(如耦合 GMOP 模型与 PLUS 模型)的方法已成为发展的主流^[21-22]。

生态环境脆弱的西北干旱区^[23]是中国陆地生态系统碳库的重要部分,近年来,该区域面临土地沙 漠化^[24]、生境质量退化^[25]、碳储量减少^[26]等生态环境问题。基于此,本文对艾比湖流域 LUCC 驱动的 碳储量时空动态特征与多情景预测进行研究。

1 艾比湖流域

1.1 研究区概况

艾比湖流域位于新疆西北部(79°53′E-85°02′E, 43°38′N-45°52′N)(图1),由北部和南侧的北天山分支 及西侧的阿拉山脉包围,东部与准噶尔盆地平原相连, 中部是谷地和平原。艾比湖流域远离海洋,地处干旱和 半干旱的环境,降水稀少、蒸发量大、气温高,属于温带 大陆性气候。该流域为典型的内陆河流域,西部是阿拉 山风口,多风沙天气,生态环境较为脆弱^[27]。流域总面



积为 5 035 616 hm²,地广人稀,是新疆最著名的农业灌溉区,农业和畜牧业是主要产业。

1.2 研究方法

首先,根据艾比湖流域 1990-2020 年 LUCC 规律,用 InVEST 模型从空间和时间尺度出发,分析 陆地生态系统碳储量演变特征,并定量分析 LUCC 动态对其影响。随后,提出了一种耦合 GM 模型, MOP 模型和 PLUS 模型的集成方法,应用于未来情景模拟和碳储量预测。

1.3 数据来源

数据类型和来源,如表1所示。土地利用数据经裁剪后,分为耕地、林地、草地、水体、建设用地、未利用地。基于矢量数据,采用欧氏距离对距道路、居民点和水体的距离进行计算。数字高程模型 (DEM)数据经过剪切后,计算得到坡度和坡向数据。所有土地利用和驱动因子数据统一坐标系至 WGS_1984_UTM 后,重采样到 100 m 分辨率,用于 PLUS 模型计算。

上述 GIS 操作和计算均在 ArcGIS 10.8.1 软件中进行。产业产值、粮食作物面积及单产等用于 MOP 模型目标函数的解算。

表1 数据类型和来源

	Tab. 1 Types and sources of data									
数捷	学型	数据名称	分辨率	数据来源						
基础	對据	土地利用	30 m	http://www.resdc.cn						
		年均降水量	1 1	http://douglos.org.cog.els.com						
		年均气温	1 KIII	http:// developers. google. com						
		干燥度	1 km	http://www.nesdc.org.cn/						
		NDVI	30 m	http://developers.google.com						
	自然因素	DEM	30 m	https://www.nasa.gov						
		坡度	20	其王 DEM 计管组列						
		坡向	50 III	举 J DEM 计昇待到						
驱动因子		土壤类型	1 km	http://vdb3. soil. csdb. cn						
		土壤侵蚀度	1 km	http://www.resdc.cn						
		夜间灯光数据	500 m	https://www.ngdc.noaa.gov/						
	社会经济 因素	GDP	1 km	http://www.rosda.ap						
		人口密度	1 KIII	http:// www.resuc.en						
		到河流和湖泊的距离								
	可达性因素	到道路的距离	—	https://www.ngcc.cn						
		到居民点的距离								
碳密	度数据	地上、地下和土壤碳密度	—	http://www.cnern.org.cn/,文献查阅						
其他统计数据		粮食作物面积及单产、产业产值	_	《中国统计年鉴》《新疆统计年鉴》《博尔 塔拉蒙古自治州统计年鉴》						

1.4 Invest 模型

每种土地利用类型对应地上、地下、土壤和死亡有机碳 4 个具有不同碳密度的碳库^[28]。碳密度(ρ) 和总碳储量(*m*₁)的计算公式分别为

$$\rho = \rho_{\text{above}} + \rho_{\text{below}} + \rho_{\text{soil}} + \rho_{\text{dead o}} \tag{1}$$

$$m_{\rm t} = \sum_{m=1}^{J} s_m \rho_m \, . \tag{2}$$

式(1),(2)中: ρ_{above} , ρ_{below} , ρ_{soil} , ρ_{dead} 分别为地类的地上、地下、土壤和死亡有机物的碳密度; s_m 为地类m的总面积;j为土地利用类型的总数量; ρ_m 为各地 表2 艾比湖流域各地类碳密度

类的碳密度。 地上、地下和土壤有机碳库为3个贡献大的碳库^[29] 各地类土壤碳密度数据本源于相关

的碳库^[29],各地类土壤碳密度数据来源于相关 研究^[30],地上和地下生物碳密度数据从国家生 态科学中心获得。艾比湖流域各地类碳密度, 如表 2 所示。

根据 InVEST 模型,对艾比湖流域未来不同土地利用方案下的碳封存经济价值进行估

Tab. 2Carbon density of each land-use type

	in Ebinur La	ke Basin	(Unit: $t \cdot hm^{-1}$)
土地利用类型	$ ho_{ m above}$	$ ho_{ m below}$	$ ho_{ m soil}$
耕地	4.56	7.45	79.50
林地	54.90	15.59	158.80
草地	0.99	8.08	105.26
水体	0.06	0	0
建设用地	0	0	0
未利用地	0.05	0	21.60

算。碳价值评估采用市场价格进行估算。当前碳的社会成本确定为 24 \$ • Mg^{-1[31]}(\$ 为美元),对未 来碳封存付款的价值进行了贴现,采用了每年 10%的市场贴现率^[32],碳价格的年际变化率确定为 0^[33]。

1.5 PLUS 模型

PLUS 模型能精确模拟 LUCC 斑块演化, 广泛应用于土地利用预测^[34]。PLUS 模型包含土地扩展 分析策略(LEAS)和基于多类型随机斑块种子的细胞自动机模块(CARS), 挖掘历史 LUCC 规则, 生成 发展概率, 并模拟未来地类斑块的形成。

艾比湖流域 2030 年土地利用变化的模拟分为两个步骤。

1)利用 2015 年数据预测 2020 年情况,与实际数据对比,验证 PLUS 模型的精度,并调整参数直至

满足要求。选取15个驱动因子,包括自然因素、社会经济因素和区域可达性因素,将这些因素输入 LEAS模块,计算各类用地的扩张概率。应用CARS模型模拟土地类型分布,并设置相关参数。

2) 基于 2020 年数据模拟未来土地利用情景。

1.6 GMOP 模型

GMOP 模型是 GM(1,1)模型和 MOP 模型的耦合,用于规划艾比湖流域的可持续土地利用,MOP 模型提供灵活的宏观决策支持,定义优化目标和约束条件^[35],GM(1,1)模型预测不同土地利用类型的价值系数,协助确定这些目标。

1) 自然发展情景(情形 S1)。假设 LUCC 的发展趋势保持不变,同时排除任何外界因素干涉的前提下,根据艾比湖流域 2015-2020 年的土地利用转移规律,利用 PLUS 模型集成的 CA-Markov 模块 线性预测了 2030 年的土地需求量。

2) 经济快速发展情景(情形 S2)。以土地经济输出最大化为首要目标,模拟了艾比湖流域各类用地的需求量,并应用 MATLAB 软件进行求解,目标函数设立为

$$\operatorname{Max} G_1(K) = \sum_{j=1}^{6} \operatorname{Eco}_j K_j \, . \tag{3}$$

式(3)中:G₁(K)为总经济效益;K_i为各土地利用类型面积;Eco_i为不同用地类型的经济效益。

参考文献[36]的研究,分别以农业、林业、牧业、渔业产值估算耕地、林地、草地、水域的经济效益;以 第二和第三产业产值之和估算建设用地的经济效益;未利用地因其经济效益不明显,设为 0.000 1。基 于 2015-2020 年历史经济数据,运用 GM(1,1)模型对 2030 年的不同地类经济效益系数进行预测,则 式(3)变换为

$$G_1(K) = 1.83K_1 + 0.18K_2 + 0.14K_3 + 0.02K_4 + 113K_5 + 0.0001K_6.$$
(4)

式(4)中:K1,K2,K3,K4,K5,K6分别为耕地、林地、草地、水体、建设用地、未利用地面积。

3) 经济和生态平衡发展情景(情形 S3)。从推动绿色低碳发展出发,以当地自然生态保护和经济发展协调发展的土地开发为目标,目标函数设置为

$$Max G_{2}(K) = \sum_{i=1}^{6} B_{i}K_{i} , \qquad (5)$$

$$\operatorname{Max}\{G_1(K), G_2(K)\}_{\circ}$$
(6)

式(5),(6)中:G₂(K)为总生态系统服务价值;B_i为第 i 种土地利用类型单位面积生态系统服务价值。

从相关统计年鉴中查阅艾比湖流域主要的粮食作物(小麦、玉米)市场单价、单产和种植面积,分别 计算出平均粮食单价、平均市场单产和平均种植面积,再根据当量因子法和中国陆地生态系统单位面积 生态服务价值系数表^[37]计算出各类用地的单位面积生态系统服务价值,则式(5)变换为

 $G_2(K) = 0.89K_1 + 3.9K_2 + 2.6K_3 + 19.85K_4 + 0.0001K_5 + 0.16K_6$ ⁽⁷⁾

结合艾比湖流域未来发展趋势、经验知识[36,38]设置多个约束条件,如表3所示。

表 3 GMOP 模型的约束条件

Tab. 3 Restrictive conditions of GMOP model

约束因素	约束条件	解释说明
总面积	$K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + K_5 + K_6 = 5\ 035\ 616\ \mathrm{hm}^2$	土地总面积为 5 035 616 hm ² ,且在发展过程中保持不变
耕地	725 534 hm² $\leqslant K_1 \leqslant$ 824 553 hm²	最大值根据 2010-2015 年耕地面积增长速度确定,最小值为 2020 年耕地面积
林地	96 423.15 hm² $\leqslant K_2 \leqslant$ 113 439 hm²	最大值为 2020 年林地面积,按 2015-2020 年面积的减少速度确 定最小值
草地	2478 391 hm² $\leqslant K_{3} \leqslant$ 2 579 527 hm²	以当前年草地面积为最大值,由 2015-2020 年间的面积减少速度 确定最小值
水体	166 058 hm² $\leqslant K_4 \leqslant$ 199 594 hm²	约束面积分别以自然发展状态和 2020 年水体面积为上、下限
建设用地	59 649 hm²≪K₅≪71 578.8 hm²	建设用地面积下限为 2030 年马尔科夫链预测值,将其 1.1 倍设为 建设用地最大规模
未利用地	$0 \mathrm{hm}^2 \leqslant K_6 \leqslant 1 \; 389 \; 920 \; \mathrm{hm}^2$	为保留土地供给能力,将2020年未利用地面积设为最大值

2 研究结果与分析

2.1 1990-2020年 LUCC 时空变化

1990-2020年,艾比湖流域土地利用类型(图 2)以草地和未利用地为主,共约占总面积的 80%(图 2(a))。由图 2(b)可知:1990-2020年,研究区每种土地利用类型都发生了重大变化;耕地和建设用地 面积显著增加,草地面积转折性猛增,其余类型面积减少,变化的趋势和程度随年份而异,尤其在2010-2015年间,随着经济的快速发展和城市化水平的显著提升,耕地和建设用地的扩张尤为突出。

由图 2 还可知:1990-2020 年,耕地面积持续扩张到两倍(由 369 507 hm² 至 725 534 hm²),而建设 用地面积则翻了 4 倍(由 16 228 hm² 至 61 138 hm²),增长幅度最大(2.77%);林地、草地、水体等自然 景观的变化也较大,其中,林地面积损失严重,虽然它在 1990-2000 年有所增加,但 2000 年开始持续减 少,由 242 211 hm² 缩减至 113 439 hm²,草地和水体增减趋势分别呈倒"V"型和"V"型,这两地类分别 在 2010-2015 年经历猛增和猛减之后,又回到各自的减少和增加状态;伴随着对经济用地的需求增加 和草地的增加,未利用地持续减少。



(a) 土地利用类型





Fig. 2 Land types of Ebinur Lake Basin from 1990 to 2020

艾比湖流域 1990-2020 年土地利用时空演变格局,如图 3 所示。由图 3 可知:由于地理条件不同, 耕地和建设用地主要分布在研究区东部和中部平原区域;草地围绕未利用地向四周延伸;林地在研究区





图 3 艾比湖流域 1990-2020 年土地利用时空演变格局

Fig. 3 Spatio-temporal distribution of land use in Ebinur Lake Basin from 1990 to 2020

三面山地和中部平原地区都有分布,近 30 年来,各地类空间布局表现出一定的变化趋势;平原绿洲区的 耕地和建设用地逐渐向外扩张,各区域林地都有明显的缩减;2010-2015 年,研究区中部和北部出现大 面积的新增草地。

1990-2020年土地利用转移矩阵,如图4所示。由图4可知:1990-2020年,艾比湖流域各年份的LUCC转变总体趋势相似。



图 4 1990-2020 年土地利用转移矩阵

Fig. 4 Land use transfer martrix from 1990 to 2020

有 1 352 823 hm² 的土地发生变化,占全流域总面积的 26.87%。耕地转入面积是转出面积的 10 倍,转入来源主要是草地和未利用地,分别占转入总量的 68.72%,25.13%,可见农田对 LUCC 贡献巨 大;建设用地的扩增主要来自草地、耕地和未利用地,分别占总增长面积的 40.53%,39.10%,18.08%, 自 2010 年,农田得到保护,农田被转换为城镇区域的情况有所缓解。草地面积的转入大于转出,其中, 未利用地是主要的转入贡献者,占总转入面积的 73.17%,草地除了用于耕地和建设用地的开发之外, 主要退化为未利用地,这跟当地放牧异常有关。林地转出面积占转入面积的 1.88%,主要向草地面积 转出,其次是耕地面积和未利用地面积,这是由于伐木、农业发展。草地、未利用地和一些耕地被恢复为 林地。值得注意的是,部分农田转变为森林,而一些住宅区则用于耕作,反映了人口迁移到城市的现象。 综上所述,林地、草地、耕地和未利用地之间的转换关系显著,以林地和草地退化,以及还草为主要模式。 2.2 1990-2020 年碳储量变化及其对 LUCC 的响应

2.2.1 碳储量时空变化 1990-2020 年艾比湖流域碳储量的变化,如图 5 所示。图 5 中:*m* 为碳储 量。由图 5 可知:1990,2000,2005,2010,2015,2020 年的总碳储量分别为 407.63×10⁶,408.14×10⁶,

407.79×10⁶,407.73×10⁶,419.15×10⁶,417.42×10⁶ t,总碳储量呈"增-减-增-减"的交替波动趋势,整体增加 了 9.79×10⁶ t;如果考虑各个地类碳储量的净增长,可 以发现耕地的碳储量(32.58×10⁶ t)大于草地(10.97× 10⁶ t),而其余地类均呈现负向增长,特别是林地的负增 长最为明显(-26.40×10⁶ t);草地是对总碳储量贡献 最大的地类,占总碳储量的 69.66%~70.65%;30 年间 总碳储量增加的主要原因在于研究区最大碳库(草地) 碳储量在 2015-2020 年大幅增加。

艾比湖流域 1990-2020 年碳储量空间分布,如图 6 所示。由图 6 可知:分布格局大致呈现为外部高碳密度 区域环绕着内部低碳密度区域的特点,高碳密度分布在



图 5 1990-2020 年艾比湖流域碳储量的变化 Fig. 5 Changes of carbon stock in Ebinur Lake Basin from 1990 to 2020

中部平原地区的草地和森林区域,以及外围三面的山地森林和草原地带;相反,低碳密度区域则集中在 南部和东部的高山冰雪带、中部、东部河谷平原区域的城镇用地,以及这些区域周围大片未利用地;城镇 区周围较为密集的中等碳密度区域主要为农田,在研究时期内这一区域逐渐扩展,碳储量的空间分布格 局与植被状况息息相关;高、中碳密度区域主要为植被覆盖良好的森林、草地和农田,具有较强的固碳能 力,相比之下,低碳密度区域则为缺乏植被的水域、裸地及被人为改造的城镇用地。



图 6 文九砌流域 1990—2020 午候咱重至问分布 Fig. 6 Spatial distribution of carbon stock in Ebinur Lake Basin from 1990 to 2020

2.2.2 地类转换对碳储量的影响 1990-2020 年艾比湖流域土地利用转化导致的碳储量变化(Δm), 如表4所示。由表4可知:艾比湖流域的碳损失主要源于林地和草地资源的耗竭,由于林地和草地的退 化分别导致2020.29×10⁴,2387.77×10⁴t的碳损失,其中,转变为草地是林地碳损失的主要原因(占 比为73.91%),它在所有土地利用转移引起的碳损失中占据了最严重的地位,而草地碳损失的主要贡 献者是向未利用地的转出(转换面积达155829 hm²),碳储存为1444.22×10⁴t,仅次于林地转变为草 地,被耕地侵占是林地和草地固碳量下降的次要原因,减少量分别为252.00×10⁴,621.02×10⁴t;将碳 密度较低的未利用地开垦为耕地虽有增加碳储量的潜力,但因耕地替代林地和草地,导致的碳排放超过 其固碳量,最终结果为碳排放(122.27×10⁴t);随着城镇化水平的提高,越来越多的草地和耕地被用于 城镇建设,引起的碳损失分别为180.90×10⁴,231.85×10⁴t,共占建设用地碳排放的91.93%;尽管发 生了这些碳流失,但森林和草地的恢复增加区域固碳量;在还草方面,由未利用地转入的面积占比最大

(73.17%),转入面积总面积为 433 219 hm²,对区域碳存储的增加做出了主要贡献,达到 4 015.07×10⁴ t;还林带来 570.22×10⁴ t的固碳量。

表 4 1990-2020 年艾比湖流域土地利用转化导致的碳储量变化

Tab. 4 Carbon stock changes due to land use transition in Ebinur Lake Basin from 1990 to 2020

上毕来到	2020 年碳储量变化/104 t								
工地失望	耕地	林地	草地	水域	建设用地	未利用地	总计		
耕地	0	24.21	37.45	-13.99	-180.90	-3.67	-136.90		
林地	-252.00	0	-1 493.18	-41.10	-16.65	-217.36	-2 020.29		
草地	-621.02	462.91	0	-90.67	-231.85	-1 444.22	-1 924.86		
水域	14.89	5.11	139.71	0	0	134.51	294.21		
建设用地	40.58	0.05	3.88	0	0	0.69	45.19		
未利用地	695.29	77.95	4 015.07	-55.20	-19.59	0	4 713.52		
总计	-122.26	570.23	2 702.93	-200.96	-448.99	-1 530.05	970.87		

空间分析结果,如图7所示。



Fig. 7 Spatial analysis results

由图 7 可知:1990-2020 年期间变化区域面积占比超过了 26%,说明碳储量空间格局经历了较大 变化,草地和未利用地之间的转换对其贡献最大(占 43.54%);增加的区域与减少的区域大致持平,在 碳储量减少的区域中,最低值位于研究区林地损失区和东部由草地转变而来的新增建设用地;以流域西 南部平原地区和南部为主呈现的"斑块状"和"链状"是草地退化为未利用地的区域,对应碳损失较低值, 研究区东部和中央平原地区呈现较为集中的碳损失较高值是由草地转变的耕地;而碳储量增加的区域 则主要分布在中部和西北部绿洲平原区的新增草地,以及中部和东部平原区的小区域新增耕地,这两个 新增地类都来源于未利用地,碳密度较低的未利用地向二者转变有利于促进碳储存。

综上所述,1990-2020年,研究区碳储量变动主要由林地减少、草地及耕地与城市用地扩张驱动。 尽管部分土地用途转变降低碳储存,草地扩展等带来的碳固定远超释放,导致碳储量总体增加。

2.3 未来不同情景下土地利用模拟和碳储量估值

使用 PLUS 模型模拟 2020 年的土地使用并与实际数据进行对比,得到总体精度为 0.97,Kappa 系 数达 0.95,FOM 系数为 0.17,表明模拟精准,适用后续模拟。不同情景下的土地利用需求量,如表 5 所 示。在所有情景中,耕地和水体均呈现增加的趋势,情景 S1 的扩张幅度最大,建设用地在情景 S2 和情 景 S3 下均增加,但在情景 S1 下略有减少,尽管情景 S2 的建设用地增速领先,且耕地增量仅次于情景 S1,但微增的水体与大幅减少的林、草地,使该情景拥有最多的未利用地,相比之下,情景 S3 中的耕地 和建设用地扩张、林地和草地退化则相对缓慢,在空间分布上,3 种情景中土地利用分布格局基本一致。

不同情景下碳储量估值对比,如表 6 所示。由表 6 可知:情景 S1 的耕地与 2020 年相比继续迅速扩 大,牺牲了林地和草地等自然景观,导致碳损失为 4.42×10⁶ t;情景 S2 的碳损失最大,原因是为经济活 动需要引发了高强度的土地利用开发,耕地和建设用地大幅增加,再加上林地和草地的退化,加快了碳 损失的速度,总量达 5.39×10⁶ t;相比之下,情景 S3 的碳损失较为缓慢,较 2020 年减少了 3.37×10⁶ t; 经济评价显示,维持历史土地利用动态将损失-78.18×10⁶ \$ •t⁻¹,情景 S2 的净碳排放成本会更高,

为一101.32×	10^{6} \$• t	⁻¹ ,而情形 S3	承担的周	成本将小得	多,分别为	青景 S1,	情景 S2	的 67.8	%,52.	3%.
			表 5 不同	情景下的土	地利用需求量	t				

上址利田米町		s/	hm ²	
工地利用尖型	2020 年	情形 S1	情形 S2	情形 S3
耕地	725 534	824 553	796 140	743 693
林地	113 439	98 448	105 536	109 531
草地	2 579 527	2 503 425	2 505 878	2 551 926
水体	166 058	199 594	176 841	199 072
建设用地	61 138	59 649	71 578	65 825
未利用地	1 389 920	1 346 893	1 379 642	$1 \ 365 \ 569$

Tab. 5 Land-use requirements under different scenarios

表 6 不同情景下碳储量估值对比

Tab. 6 Comparison of carbon stock valuation under different scenarios

参数	2020 年	情形 S1	情形 S2	情形 S3
$m_{ m t}/10^6$ t	417.42	413.01	412.04	414.06
$\Delta m/10^6$ t	_	-4.42	-5.39	-3.37
经济估值/10 ⁶ \$ • t^{-1}	_	-78.18	-101.32	-53.02

3 个情景中碳储量分布相较于 2020 年的变化,如图 8 所示。由图 8 可知:不同情景下流域大部分 区域碳储量保持平衡,其中,情景 S1 的中部和南侧谷地和平原出现碳储量的较高值,此地区未利用地扩 展为耕地;情景 S2 碳储存减少的面积明显比增加区域多,东部奎屯河下游绿洲地区碳储量低值较为密 集,是建设用地扩张引起的,情景 S1 和情景 S2 碳储量减少的其他区域基本相似,主要表现为西北部和 南部森林退化及中部和其他区域耕地侵占草地和建设用地扩张引起的零散的低值;情景 S3 相对于情景 S1 和情景 S2,碳储量的低值区域明显变少,这表明该情景的发展模式(考虑生态保护的土地开发)最大 限度地减少了森林向耕地和建设用地的转化,这种方法还控制了建设用地和耕地的扩张幅度。因此,适 当实施生态保护措施有助于减少碳储存的损失,与另外两种情景相比,情景 S3 受人活动影响较小并考 虑生态保护,显然是艾比湖流域的最佳发展模式。



图 8 3个情景中碳储量分布相较于 2020 年的变化

Fig. 8 Changes of carbon storage distribution in three scenarios compared to 2020

3 讨论与结论

3.1 讨论

3.1.1 LUCC 动态对碳储量的影响 LUCC 导致的碳损失主要发生在自然景观,尤其是森林,转为农田、牧场或人造地表^[39]。在艾比湖流域,由于农业需求,大量森林和草原被转为耕作、放牧用地,导致该地区生态服务功能衰退。研究显示,耕地扩张以牺牲自然景观为代价,导致严重的碳储量下降,最终结果是碳损失而非增加(122.27×10⁴ t)。

随着艾比湖流域城市化的加速,草地被侵占,同时,一些耕地也开始转用于城镇建设,导致流失 180.90×10⁴ t的碳储存,此现象也在其他研究中得到验证^[40-41]。因此,为了防止农田过度增长和保护 现有耕地不被城镇建设占用,应采取相关措施,这将有利于区域碳储量的增加^[8]。作为植被以草本为主

的干旱区,草地破坏是本区碳流失的主要原因之一。平原绿洲的人类居住地及耕地扩张加剧草地退化。 然而,草地主要向未利用地退化,归因于过度放牧等人类活动^[42]。值得注意的是,具备最高碳密度的森 林(图 6)退化代表碳排放而不是碳封存^[33,43],而且在单位面积上排放量最为严重(图 8)。

在艾比湖流域,草地退化和改善同在,尤其是在 2010-2015 年,草地面积显著增长,这主要是由于 当地实施退牧还草措施和气候暖湿化^[44]的影响。蔡朝朝等^[45]在新疆地区也发现草地覆盖表现出增加 的趋势,而草地变化是气候因素和人类活动共同影响的结果^[46-47]。草地的这种转折性增长是研究区三 十年间总碳储量增加的主要原因(固碳量达 1 097×10⁴ t)。另外,对一些草地进行的植树造林活动和森 林自然恢复,也促使了区域碳储量的增加(462.91×10⁴ t)。

3.1.2 3种情景对比分析和未来发展建议 为了响应 2030 年中国《碳达峰》战略^[48],设计了几种土地 利用方案,旨在为该流域 2030 年低碳发展提出最优模式。模拟结果表明,延续历史 LUCC 动态的情景 S1下,2030 年碳排放量增加 4.42×10⁴ t。情景 S2 因经济用地扩张牺牲自然生态,导致更严重的碳损 失。相比之下,情景 S3 下 LUCC 动态不显著,有效避免了森林和草地的高强利用带来的碳排放和生态 系统的退化^[49],因此,碳损失和社会经济成本更低,显示出通过合理社经发展和土地节约可减缓碳损 失,与现有研究^[40,50]相吻合。

内陆干旱区的森林和草原对人为活动极为敏感^[51-52]。值得注意的是,草地退化为未利用地的趋势 在各情景中仍然存在,因此,未来的规划与管理中需减少人为干扰,采取禁牧、补播等措施修复退化草 地,并加强林业支持,以提升草地和森林保护,从而固定更多的碳。同时,根据《2030年前碳达峰行动方 案》指导,控制建设用地过快增长,并强化绿色低碳、集约高效的基础设施建设。通过合理管理和生态恢 复项目,可以提高碳储存能力^[53-54],情景 S3 可减少对生态系统服务的不利影响。此外,碳储量的经济 成本评估结果为政府和利益相关者提供了决策依据。

3.1.3 模型优势与局限 基于 LUCC 模拟的碳储量演变研究中,GMOP-PLUS 耦合模型能够克服以 往单一数量模拟模型的缺陷^[55],通过约束条件和多个目标的设定,将土地生态和社会经济效益运用到 未来土地利用数量和空间优化过程中。运用此模型设定了适用于本地的约束条件和多目标函数,对研 究区未来 LUCC 进行了优化,并在 InVEST 模型采用当地的碳密度数据,准确评估了流域碳储存和封 存及其经济价值。经过优化的发展情景 S3,即注重生态和经济协调性的方案,能够有效减缓碳损失,这 表明此模型在该流域能够成为探索以碳减排为目标的土地发展策略的有力工具。

InVEST 模型的碳储量模块只考虑不同地类之间的碳密度差异,而忽略了土地利用类型内部^[56]及 植被特征^[20]可能引起的固碳功能上的差异。在未来的研究中应该用实测数据验证碳密度数据是否合 理,以提高碳储量估算精度。如果 3 种基于社会经济影响的土地配置情景模拟能够纳入气候因素,对于 未来土地利用预测会更加科学。

3.2 结论

深入探讨了艾比湖流域碳储量的时空变化及 LUCC 对其影响,并评估了不同土地利用情景下的潜 在经济成本,有如下 3 个结论。

1) 过去 30 年间,艾比湖流域 LUCC 动态显著,经历转换的区域占总面积的 26.87%,耕地、草地和 建设用地之外的地类都呈"入不敷出"的状态。

2) LUCC 格局影响着碳储量变化。历史期间,研究区碳储量呈"增-减-增-减"的变化趋势,总增加 量为 9.79×10⁶ t,其中,草地增长对碳储量的增加贡献最大。从空间上看,碳储量大致呈外部高碳密度 区围绕内部低碳密度区分布的特点。研究区平原耕作带耕地迅速扩张和周围建设用地的增加、林地大 幅退化及草地的转折性增加是导致该流域碳储量总体变化的主要驱动力。

3) 未来 3 种情景下的 LUCC 动态化有所不同,导致碳储量减少的程度有差异。情景 S2 因经济用 地开发剧烈,碳储量损失和应承担的经济成本最严重。延续历史发展的情景 S1,碳储量空间变化与情 景 S2 相似,但损失量相对较小。相比之下,加入生态环境保护措施的情景 S3 碳损失和经济成本预计大 大减小。这表明,较完好地保留森林和草地等自然景观,同时控制耕地和建设用地的过度扩张,将有利 于减缓碳储量的损失。

511

参考文献:

- [1] JO H. Impacts of urban greenspace on offsetting carbon emissions for middle Korea[J]. Journal of Environmental Management, 2002, 64(2):115-126. DOI:10.1006/jema.2001.0491.
- [2] CHAPIN F S, MATSON P A, VITOUSEK P M , et al. Principles of terrestrial ecosystem ecology[M]. New York: Springer, 2011.
- [3] HOUGHTON R A, HOUSE J I, PONGRATZ J, et al. Carbon emissions from land use and land-cover change[J]. Biogeosciences, 2012, 9(12):5125-5142. DOI:10.5194/bg-9-5125-2012.
- [4] WANG Jing, FENG Liang, PALMER P I, et al. Large Chinese land carbon sink estimated from atmospheric carbon dioxide data[J]. Nature, 2020, 586(7831):720-723. DOI:10.1038/s41586-020-2986-1.
- [5] 马晓哲,王铮.土地利用变化对区域碳源汇的影响研究进展[J].生态学报,2015,35(17):5898-5907.DOI:10.5846/ stxb201312112932.
- [6] MAHOWALD N M, RANDERSON J T, LINDSAY K, et al. Interactions between land use change and carbon cycle feedbacks[J]. Global Biogeochemical Cycles, 2017, 31(1):96-113. DOI:10.1002/2016GB005374.
- [7] WU Jiansheng, CHEN Bikai, MAO Jiaying, *et al.* Spatiotemporal evolution of carbon sequestration vulnerability and its relationship with urbanization in China's coastal zone[J]. Science of the Total Environment, 2018, 645: 692-701. DOI:10.1016/j. scitotenv. 2018. 07. 086.
- [8] 柯新利,唐兰萍.城市扩张与耕地保护耦合对陆地生态系统碳储量的影响:以湖北省为例[J].生态学报,2019,39 (2):672-683. DOI:10.5846/stxb201712042177.
- [9] 张斌,李璐,夏秋月,等."三线"约束下土地利用变化及其对碳储量的影响:以武汉城市圈为例[J].生态学报,2022, 42(6):2265-2280. DOI:10.5846/stxb202101070075.
- [10] WU Weiguang, YING Zhu, WANG Yifei. Spatio-temporal pattern, evolution and influencing factors of forest carbon sinks in Zhejiang Province, China[J]. Forests, 2023, 14(3):445. DOI:10.3390/f14030445.
- [11] 陈媛. 土地利用变化对区域碳汇的影响综述[J]. 地矿测绘, 2020, 3(3): 35. DOI: 10. 32629/gmsm. v3i3. 727.
- [12] 刘晓娟,黎夏,梁迅,等. 基于 FLUS-InVEST 模型的中国未来土地利用变化及其对碳储量影响的模拟[J]. 热带地 理,2019,39(3):397-409. DOI:10.13284/j. cnki. rddl. 003138.
- [13] ZHIYANSKI M,GLUSHKOVA M,FEREZLIEV A, et al. Carbon storage and soil property changes following afforestation in mountain ecosystems of the Western Rhodopes, Bulgaria[J]. Iforest-Biogeosciences and Forestry, 2016,9(4):626. DOI:10.3832/ifor1866-008.
- [14] 张影,谢余初,齐姗姗,等. 基于 InVEST 模型的甘肃白龙江流域生态系统碳储量及空间格局特征[J]. 资源科学, 2016,38(8):1585-1593. DOI:10.18402/resci. 2016.08.16.
- [15] LI Jingtai, YANG andan, YAO Xiuying, et al. Dynamics of carbon storage in saltmarshes across China's Eastern Coastal Wetlands from 1987 to 2020[J]. Frontiers in Marine Science, 2022, 9:915727. DOI:10.3389/fmars. 2022. 915727.
- [16] WANG Ningfei, CHEN Xingpeng, ZHANG Zilong, et al. Spatiotemporal dynamics and driving factors of countylevel carbon storage in the Loess Plateau: A case study in Qingcheng County, China[J]. Ecological Indicators, 2022,144:109460. DOI:10.1016/j. ecolind. 2022.109460.
- [17] ZARANDIAN A, MOHAMMADYARI F, MIRSANJARI M M, et al. Scenario modeling to predict changes in land use/cover using Land Change Modeler and InVEST model: A case study of Karaj Metropolis, Iran[J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2023, 195(2):273. DOI:10.1007/s10661-022-10740-2.
- [18] ZHAO Dengyue, XIAO Mingzhu, HUANG Chunbo, et al. Land use scenario simulation and ecosystem service management for different regional development models of the Beibu Gulf Area, China[J]. Remote Sensing, 2021, 13 (16):3161. DOI:10.3390/rs13163161.
- [19] AN Xuexian, JIN Wenping, LONG Xiangren, et al. Spatial and temporal evolution of carbon stocks in Dongting Lake wetlands based on remote sensing data[J]. Geocarto International, 2022, 37(27):14983-15009. DOI:10.1080/ 10106049.2022.2093412.
- [20] 朱文博,张静静,崔耀平,等.基于土地利用变化情景的生态系统碳储量评估:以太行山淇河流域为例[J].地理学报,2019,74(3):446-459. DOI:10.11821/dlxb201903004.
- [21] 乔治,蒋玉颖,贺瞳,等.土地利用变化模拟研究进展[J].生态学报,2022,42(13):5165-5176.DOI:10.5846/ stxb202106201639.

- [22] SADEGHI S H R, JALILI K, NIKKAMI D. Land use optimization in watershed scale[J]. Land Use Policy, 2009, 26(2):186-193. DOI:10.1016/j. landusepol. 2008. 02. 007.
- [23] 陈亚宁,李稚,范煜婷,等.西北干旱区气候变化对水文水资源影响研究进展[J].地理学报,2014,69(9):1295-1304.DOI:10.11821/dlxb201409005.
- [24] DING Hua, HAO Xingming. Spatiotemporal change and drivers analysis of desertification in the arid region of northwest China based on geographic detector[J]. Environmental Challenges, 2021, 4:100082. DOI: 10.1016/j. envc. 2021.100082.
- [25] 王晓琴,王宏卫,谈波,等.新疆阿克苏地区景观格局与生境质量时空演变及影响机制[J].华侨大学学报(自然科学版),2022,43(6):777-789. DOI:10.11830/ISSN.1000-5013.202203041.
- [26] ZHU Guofeng, QIU Dongdong, ZHANG Zhuanxia, et al. Land-use changes lead to a decrease in carbon storage in arid region, China[J]. Ecological Indicators, 2021, 127:107770. DOI:10.1016/j. ecolind. 2021.107770.
- [27] WEI Qianqian, MUKADASI A, HALIKE A, et al. Temporal and spatial variation analysis of habitat quality on the PLUS-InVEST model for Ebinur Lake Basin, China[J]. Ecological Indicators, 2022, 145:109632. DOI: 10.3390/ w11102171.
- [28] SHARP R, TALLIS H, RICKETTS T, et al. InVEST user's guide[J]. The Natural Capital Project: Stanford, 2014,306. DOI:10.13140/RG.2.2.32693.78567.
- [29] NIE Xin,LU Bo,CHEN Zhoupeng, et al. Increase or decrease? Integrating the CLUMondo and InVEST models to assess the impact of the implementation of the major function oriented zone planning on carbon storage[J]. Ecological Indicators, 2020, 118:106708. DOI: 10.1016/j. ecolind. 2020.106708.
- [30] 张杰,李敏, 敖子强, 等. 中国西部干旱区土壤有机碳储量估算[J]. 干旱区资源与环境, 2018, 32(9): 132-137.
- [31] RIKE K, DROUET L, CALDEIRA K, et al. Country-level social cost of carbon[J]. Nature Climate Change, 2018, 8 (10):895-900. DOI:10.1038/s41558-018-0282-y.
- [32] 邓元杰,姚顺波,侯孟阳,等.退耕还林还草工程对生态系统碳储存服务的影响:以黄土高原丘陵沟壑区子长县为例[J].自然资源学报,2020,35(4):826-844.DOI:10.31497/zrzyxb.20200407.
- [33] ZARANDIAN A, BADAMFIROUZ J, MUSAZADEF R, *et al*. Scenario modeling for spatial-temporal change detection of carbon storage and sequestration in a forested landscape in Northern Iran[J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2018, 190(8): 474. DOI:10.1007/s10661-018-6845-6.
- [34] LIANG Xun, GUAN Qingfeng, CLARKE K C, et al. Understanding the drivers of sustainable land expansion using a patch-generating land use simulation (PLUS) model: A case study in Wuhan, China[J]. Computers, Environment and Urban Systems, 2021, 85:101569. DOI: 10.1016/j. compenvurbsys. 2020. 101569.
- [35] GARDINER L R,STEUER R E. Unified interactive multiple objective programming: An open architecture for accommodating new procedures[J]. Journal of the Operational Research Society, 1994, 45:1456-1466. DOI:10.1038/ sj/jors/0451212.
- [36] WANG Ying, LI Xiangmei, ZHANG Qi, et al. Projections of future land use changes: Multiple scenarios-based impacts analysis on ecosystem services for Wuhan City, China[J]. Ecological Indicators, 2018, 94: 430-445. DOI: 10. 1016/j. ecolind. 2018. 06. 047.
- [37] 谢高地,张彩霞,张雷明,等. 基于单位面积价值当量因子的生态系统服务价值化方法改进[J]. 自然资源学报, 2015,30(8):1243-1254. DOI:10.11849/zrzyxb.2015.08.001.
- [38] GAO Lina, TAO Fei, LIU Runrui, et al. Multi-scenario simulation and ecological risk analysis of land use based on the PLUS model: A case study of Nanjing[J]. Sustainable Cities and Society, 2022, 85:104055. DOI:10.1016/j. scs. 2022.104055.
- [39] HAN Yiwen, KANG Wanmo, SONG Youngkeun. Mapping and quantifying variations in ecosystem services of urban green spaces: A test case of carbon sequestration at the district scale for Seoul, Korea (1975-2015)[J]. International Review for Spatial Planning and Sustainable Development, 2018, 6(3): 110-120. DOI: 10. 14246/irspsd. 6. 3_110.
- [40] YANG Hang, HUANG Junlong, LIU Dianfeng. Linking climate change and socioeconomic development to urban land use simulation: Analysis of their concurrent effects on carbon storage[J]. Applied Geography, 2020, 115: 102135. DOI:10.1016/j.apgeog. 2019.102135.
- [41] TAO Yu, LI Feng, WANG Rusong, et al. Effects of land use and cover change on terrestrial carbon stocks in ur-

banized areas: A study from Changzhou, China[J]. Journal of Cleaner Production, 2015, 103: 651-657. DOI: 10. 1016/j. jclepro. 2014. 07. 055.

- [42] CHEN Tao, BAO Anming, JIAPAER G, et al. Disentangling the relative impacts of climate change and human activities on arid and semiarid grasslands in Central Asia during 1982-2015[J]. Science of the Total Environment, 2019,653:1311-1325. DOI:10.1016/j. scitotenv. 2018. 11.058.
- [43] JAPELAGHI M, HAJIAN F, GHOLAMALIFARD M, et al. Modelling the impact of land cover changes on carbon storage and sequestration in the central zagros region, Iran using ecosystem services approach[J]. Land, 2022, 11 (3):423. DOI:10.3390/land11030423.
- [44] 丁一汇,柳艳菊,徐影,等.全球气候变化的区域响应:中国西北地区气候"暖湿化"趋势、成因及预估研究进展与 展望[J].地球科学进展,2023,38(6):551-562. DOI:10.11867/j.issn.1001-8166.2023.027.
- [45] 蔡朝朝,淮永建,白涛,等.基于 NDVI 的新疆草地覆盖变化特征[J].应用基础与工程科学学报,2020,28(6):1369-1381. DOI:10.16058/j.issn.1005-0930.2020.06.010.
- [46] LIU Yangyang, WANG Qian, ZHANG Zhaoying, et al. Grassland dynamics in responses to climate variation and human activities in China from 2000 to 2013[J]. Science of the Total Environment, 2019, 690:27-39. DOI:10.1016/ j. scitotenv. 2019. 06. 503.
- [47] ZHANG Renping, LIANG Tiangang, GUO Jing, et al. Grassland dynamics in response to climate change and human activities in Xinjiang from 2000 to 2014[J]. Scientific Reports, 2018, 8(1):2888. DOI:10.1038/s41598-019-41390-z.
- [48] FANG Kai, TANG Yiqi, ZHANG Qifeng, et al. Will China peak its energy-related carbon emissions by 2030? Lessons from 30 Chinese provinces[J]. Applied Energy, 2019, 255:113852. DOI: 10.1016/j. apenergy. 2019.113852.
- [49] LU Fei, HU Huifeng, SUN Wenjuan, et al. Effects of national ecological restoration projects on carbon sequestration in China from 2001 to 2010[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2018, 115(16): 4039-4044. DOI:10.1073/pnas.170029411.
- [50] LIANG Youjia, LIU Lijun, HUANG Jiejun. Integrating the SD-CLUE-S and InVEST models into assessment of oasis carbon storage in Northwestern China[J]. Plos One, 2017, 12(2): e0172494. DOI: 10. 1371/journal. pone. 0172494.
- [51] LI Chuanhua, WANG Yutao, WU Xiaodong, et al. Reducing human activity promotes environmental restoration in arid and semi-arid regions: A case study in Northwest China[J]. Science of the Total Environment, 2021, 768: 144525. DOI:10.1016/j. scitotenv. 2020.144525.
- [52] YAN Junjie, ZHANG Guangpeng, DENG Xiaoya, et al. Does climate change or human activity lead to the degradation in the grassland ecosystem in a mountain-basin system in an arid region of China? [J]. Sustainability, 2019, 11 (9):2618. DOI:10.3390/su11092618.
- [53] YU Zhen,LU Chaoqun,CAO Peiyu,et al. Long-term terrestrial carbon dynamics in the Midwestern United States during 1850-2015: Roles of land use and cover change and agricultural management[J]. Global Change Biology, 2018,24(6):2673-2690. DOI:10.1016/j. ecolind. 2020.106939.
- [54] ZHANG Fan, XU Ning, WANG Chao, et al. Effects of land use and land cover change on carbon sequestration and adaptive management in Shanghai, China[J]. Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/b/c, 2020, 102948. DOI:10.1016/j. pce. 2020. 102948.
- [55] ZHU Liya, SONG Ruixiang, SUN Shuang, et al. Land use/land cover change and its impact on ecosystem carbon storage in coastal areas of China from 1980 to 2050[J]. Ecological Indicators, 2022, 142:109178. DOI: 10. 1016/j. ecolind. 2022. 109178.
- [56] FRYER J, WILLIAMS I D. Regional carbon stock assessment and the potential effects of land cover change[J].
 Science of the Total Environment, 2021, 775:145815. DOI:10.1016/j. scitotenv. 2021.145815.

(责任编辑:陈志贤 英文审校:刘源岗)

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202403033



多特征融合的焊缝图像多标签分类算法

牛顿1,林宁2,林振超2,黄凯2,王合佳1,郑力新1

(1. 华侨大学 工学院,福建 泉州 362021;2. 福建省特种设备检验研究院,福建 泉州 362021)

摘要: 为了实现焊缝缺陷的准确分类,提出一种多特征融合的焊缝图像多标签分类算法。首先,通过残差神 经网络(ResNet-50)提取图像的特征信息,根据得到的特征图构建图结构,提出关联度引导邻域传播 (RDGNP)算法优化图结构;然后,使用图卷积神经网络(GCN)提取图结构的特征信息,并设计特征融合模块 实现图像特征和图结构特征的结合;最后,得到多标签分类结果。实验结果表明:文中算法能够有效地实现焊 缝缺陷的多标签分类,在X射线焊缝缺陷数据集上的性能有明显提升。

中图分类号: TP 391.41; TU 229 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2024)04-0514-10

关键词: 多标签分类; 全局相关性; 图像特征; 图结构特征; 特征融合

Weld Image Multi-Label Classification Algorithm Based on Multi-Feature Fusion

NIU Dun¹, LIN Ning², LIN Zhenchao², HUANG Kai², WANG Hejia¹, ZHENG Lixin¹

College of Engineering, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China;
 Fujian Special Equipment Inspection and Research Institute, Quanzhou 362021, China)

Abstract: In order to achieve accurate classification of welding defects, a weld image multi-label classification algorithm based on multi-feature fusion is proposed. Firstly, feature information of images is extracted by a residual neural network (ResNet-50), and the graph structure is constructed based on the obtained feature maps. An algorithm named relation degree guided neighborhood propagation (RDGNP) is proposed to optimize the graph structure. Then, the feature information of the graph structure is extracted using graph convolution-al neural network (GCN), and a feature fusion module is designed to achieve the combination of image features and graph structure features. Finally, multi-label classification results are obtained. Experimental results show that the proposed method can effectively realize the multi-label classification of welding defects, and its performance on the X-ray welding defects dataset is significantly improved.

Keywords: multi-label classification; global relevance; image feature; graph structure feature; feature fusion

随着现代工业的迅速发展,工业焊接在高压、高负荷环境下的广泛应用对焊件的质量提出严格要求。在焊接过程中,焊件质量容易受到环境和人为因素等多方面影响,产生裂纹、气孔、夹渣、未熔合和 未焊透等缺陷^[1]。为了避免工程事故的发生,必须对焊件进行全面的缺陷检测与分类。

传统的人工观察焊缝图像方法一般由专业检验员执行,然而这种方法存在多种主观因素,效率较

收稿日期: 2024-03-20

基金项目: 福建省科技计划项目(2020Y0039);福建省泉州市科技计划项目(2020C042R)

通信作者: 郑力新(1967-),男,教授,博士,主要从事图像分析、机器视觉、深度学习方法的研究。E-mail:zlx@hqu. edu.cn。

低,检验过程中容易出现漏检和误检等问题^[2]。近年来,随着大数据的普及和计算能力的提升,深度学 习算法迅速崛起,以深度学习为基础的焊缝图像处理方法被广泛应用。Say等^[3]利用数据增强技术对 公共数据集 GDXray 进行数据扩增,通过卷积神经网络(CNN)模型识别出 6 种焊缝缺陷类别,取得了 92.0%的准确率。Kumaresan 等^[4]通过 VGG-16 模型实现焊缝缺陷分类,平均准确率达到 90.0%。 Totino 等^[5]基于迁移学习方法,使用 SqueezeNet 模型实现 4 种焊缝缺陷的分类任务,准确率达到 93.3%。经典的卷积神经网络采用局部感受野和权值共享,以分层的方法提取局部特征^[6]进行图像特 征表示,但是该方法仅针对图像的局部信息进行分析,未能全面考虑到图像的全局信息。由于焊缝区域 可能存在环境复杂和缺陷形状各异、分布随机等情况,要求网络从全局综合分析并处理图像的特征信 息,而卷积神经网络从图像中提取的局部特征会丢失其全局信息,使卷积神经网络难以提升应用于多标 签焊缝图像的分类准确率。

Bruna 等^[7]提出图神经网络(GNN),通过向神经网络中引入图结构,能够很好地获取特征图的全局结构信息,弥补神经网络对图像全局相关性的不敏感。Kipf等^[8]提出一种创新的图卷积神经网络(GCN),将卷积神经网络扩展到图结构上。Wang等^[9]构建一种图引导卷积神经网络(GCNN),利用训练样本之间的相似度构建图结构,结果表明,GCNN可以有效地提高VGG-11的特征提取能力,解决基础模型在分析类间相似性和类内差异性时的不足,使其具有更优的分类效果。Balcioglu等^[10]使用GCN进行金属螺母零件表面缺陷的分类任务,其准确率相较于 2D-CNN 提高了 2.955 4%。

目前,图神经网络大多数应用于表面缺陷的分类,表面缺陷往往具有较大的尺寸,且形状较为简单 直观,而内部缺陷通常具有尺寸微小、结构复杂等特点,利用 GCN 实现焊缝内部缺陷分类任务不足以 充分理解图像的细节特征信息,因此,对焊缝内部缺陷的分类研究仍然较少。综合考虑当前焊缝缺陷分 类算法的不足和图像分类算法的发展,结合分析焊缝图像的局部关键信息和全局结构信息,进行焊缝缺 陷的多标签分类任务^[11],从而代替人工实现高效焊件分类工作,本文提出一种多特征融合的焊缝图像 多标签分类算法。

1 多特征融合的焊缝图像多标签分类算法

多特征融合的焊缝图像多标签分类算法框架,如图1所示。该框架主要包括图像特征提取模块、图 结构重构模块、图结构特征提取模块和特征融合模块4个部分。首先,在残差神经网络(ResNet-50)中 引入 Res2Net 模块以提取焊缝图像的多尺度特征信息;其次,根据焊缝图像的特征图构建初始的图结 构,并提出关联度引导邻域传播(RDGNP)算法,进一步细致优化图结构;接着,通过 GCN 提取图结构 的特征信息;最后,将图像特征与图结构特征输入特征融合模块进行结合,经过多标签分类器得到焊缝 图像所含缺陷类别。



图 1 多特征融合的焊缝图像多标签分类算法框架

Fig. 1 Framework of multi-label classification algorithm for welding images based on multi-feature fusion

1.1 图像特征提取模块

焊缝缺陷往往存在尺寸微小的情况,导致卷积神经网络无法很好地提取缺陷区域的特征信息。为 了丰富焊缝缺陷的语义信息,提高图结构表达特征之间相似性信息的准确性,采用 ResNet-50 作为基础 模型用于焊缝图像的特征提取。同时,在 ResNet-50 的每一个 BottleNeck Block^[12]中引入 Res2Net 模 块^[13],从粒度级别提取焊缝缺陷的多尺度特征,得到多层次的焊缝缺陷特征组合,增大每个网络层的感

受野,进一步增强网络对焊缝缺陷的特征表达能力,以满足网络对焊缝图像感兴趣区域的关注需求。图 像特征提取模块的结构,如图2所示。



图 2 图像特征提取模块结构图

Fig. 2 Structure diagram of image feature extraction module

在 BottleNeck Block 结构中,使用 Res2Net 模块替换中间的 3×3 卷积,具体地,经过 1×1 卷积后, 将输入的特征图划分为 T 个子集,记为 X_i , $t=1,2,\dots,T$,各子集尺寸大小相同,通道数为输入特征图 通道数的 1/t。在每一个子集中,除第一个通道外,每一个通道都包含前一个通道的特征信息;接下来, 将 T 个子集输出的特征图进行拼接,然后进行 1×1 卷积,得到多层次的焊缝缺陷特征组合,这样能够 产生具有多种尺度和不同感受野的特征,从而改善模型提取焊缝缺陷特征能力的不足。

为了进行 ResNet-50 的预训练模型迁移,进一步优化模型的学习能力,在原模型基础上,去除用于 控制图像维度的平均池化层及用于分类的全连接层,可以得到焊缝图像的特征提取器。将焊缝图像作 为图像特征提取器的输入,可得到焊缝图像的特征图为

$$F = f_{\text{ResNet}}(I; \theta_{\text{ResNet}}) \in \mathbf{R}^{H \times W \times C}$$
(1)

式(1)中:F为包含 Res2Net 的 ResNet-50 提取的特征图; f_{ResNet} 为焊缝图像的特征提取器,即包含 Res2Net 的 ResNet-50 模型;I为输入的焊缝图像; θ_{ResNet} 为图像特征提取器的参数;H,W,C分别为特征图的高度、宽度和通道数。

由图 2 可知:在图像特征提取模块的末端,引入一个全局平均池化(GAP)层,用于处理最后一个 BottleNeck Block 输出的特征图,最终提取到图像特征 $F_{CNN} \in \mathbf{R}^{c}$ 。

1.2 图结构重构模块

1.2.1 图结构初构模块 虽然图像特征提取模块利用包含 Res2Net 的 ResNet-50 提取焊缝图像的局部关键特征,但是未能学习到其中的全局结构特征,模型无法很好地学习和处理形状各异、分布随机的焊缝缺陷。图结构能够有效地描述数据间的复杂关系,对焊缝图像的特征图进行特征重构,通过构建图结构连接邻居特征以增强单个特征,从而更好地捕捉图像中的上下文信息。焊缝图像作为图像特征提取模块的输入,经过提取多尺度特征得到特征图后,将焊缝图像的每个特征 $f_i \in \mathbb{R}^{C}$ 视为一组无序的节点 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_i, \dots, v_n\}$ ($i = 1, 2, \dots, n$)进行图结构的构建。为了更加快速地构建焊缝图像的初始图,距离度量方法采用欧式距离函数,引入 K 近邻(KNN)算法构建 KNN 图作为表示特征之间相似性关系的图结构。

为了提高模型的推理速度,从特征图中划分出一个子集进行图结构的构建。设子集特征个数为 S, 那么,子集的特征图可以重写为 $F_s = [f_1, f_2, \dots, f_s], 其中, s = 1, 2, \dots, S, f_s \in \mathbb{R}^c$ 为所选子集的 单个特征。在子集包含的特征样本中,通过 KNN 算法为每一个节点 v_s 找到与其最近邻的 k 个节点,即 v_s 的 K 近邻节点 $N_k(v_s)$,并在 v_s 与其邻居节点 v_m 之间添加一条边 e_s^m ,则构建出子集的 KNN 图 $g_s = (v_s, \epsilon_s)$,其中, v_s 为子集中每个特征 f_s 组成的节点集合, ϵ_s 为子集中所有节点之间的边集合。

搜索特征图的所有剩余特征样本来完善子集的 KNN 图,从而构建初始图,适应焊缝缺陷的复杂结构,并降低计算复杂度。对于子集中的每一个节点 v_s,引入爬山(HC)算法^[14]搜索除子集外的所有剩余特征样本,分别与 v_n进行比较,并将比较后的特征样本存储在 2 个优先级队列 Q 和 R 中。在每次迭代

中,Q中存储v,的前k个最近邻居节点,搜索到的邻居节点根据与v,的距离按升序排名,不断更新距离 更近的邻居节点,并保持最近邻居节点的个数为k。R中存储v,的最近邻居节点个数不固定,但是优先 级顺序与Q相同。R除了用于存储最近邻居节点,也存储最近邻居节点的K距离邻域。

由于 HC 算法只是考虑当前符合最近邻居条件的节点,容易陷入局部最优,为了保证算法更加全面 地选择特征样本,使用反向 K 近邻(RKNN)算法^[15],保证选择的特征样本与原特征样本具有良好的相 似性,避免选择相异的特征样本。通过搜索 RKNN 图 \overline{G} 找到与 v_s 距离最近的 r_o ,并根据 RKNN 图分析 r_o 的近邻关系,从中选择出与 v_s 最相似的邻居节点,并将其加入到 Q 和 R 中,进行最近邻居节点更新。 接着,将 KNN 图 g_s 加入到 Q 中进行最近邻居节点更新。当 Q 不再更新或者 R 已经为空时,迭代结 束,得到 v_i 的 K 近邻节点 $N_k(v_i)$ 。由此构建焊缝图像的初始图 $g=(V,\epsilon)$,其中, ϵ 为初始图中所有节 点之间的边集合。

1.2.2 图结构优化模块 在采用 HC 算法进行搜索的过程中,仅仅考虑部分足够接近节点 v_s 的邻居 节点 r₀ 的邻域用于更新 v_s 的最近邻居。然而,在 R 中存储的所有最近邻居节点的邻域中,可能存在一 些节点在搜索期间未与 v_s 进行比较,导致遗漏访问特征样本的问题。为此,选择利用 R 中每一个最近 邻居节点 r 的邻域进一步更新 v_s 的最近邻居节点,以更加充分地完善图结构。

提出 RDGNP 算法,通过描述节点之间的关联度(RD)^[16],引导邻域的传播,其表达式为

$$\operatorname{Rel}(O,P) = \frac{O_P + P_O}{k} \,. \tag{2}$$

式(2)中:Rel(•)表示关联度函数;O_P表示节点O在节点P的按升序排名的邻居节点集合中的排名位置;P_o表示节点P在节点O的按升序排名的邻居节点集合中的排名位置。Rel(•)的值越小,节点之间的关联度越高,则说明二者具有相似性关系的可能性越大。且当 Rel(O,P)≥1 时,O 与P 的关联度很低,则特征样本之间不具有相似性。

在每次迭代中,将待传播的最近邻居节点 r 加入到工作队列 W 中,若其邻居节点满足条件 Rel(v_s , p)<1。这说明 p 与 v_s 具有一定相似性,故将其也加入到工作队列 W 中,即实现邻域的传播。不断重 复上述步骤,直到工作队列为空,即没有新的邻居节点可用于传播。通过迭代地传播邻居信息,不断提 升 KNN 图的质量,从而提高特征之间相似性关系的描述准确性。利用关联度反映节点之间的相似性 信息,算法更加针对性地选择具有相似性的特征样本进行传播。最终构建焊缝图像的图结构 G = (V, E, A),其中,E 为图结构中所有节点之间的边集合;A 为图结构的邻接矩阵, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$,若 $v_i \in N_k(v_j)$,或 $v_i \in N_k(v_i)$,则 $A_{i,i} = 1$,否则 $A_{i,i} = 0$.

1.3 图结构特征提取模块

为了学习图结构中各节点之间的邻居信息,以 挖掘不同复杂特征之间蕴含的上下文关系,解决焊 缝图像中缺陷形状各异、分布随机的问题,采用GCN 作为图结构的特征提取器,用于焊缝图像的全局结 构特征的提取。图结构特征提取模块结构,如图 3 所示。GCN 通过聚合邻居节点的特征信息来实现 上下文信息的传递,由于构建的图结构中每一个节 点均代表单个特征样本,其邻接矩阵不能充分准确 地表达该图结构,因此,采用邻接矩阵和节点矩阵共 同进行表达。然而,将邻接矩阵和节点矩阵相乘后,



图 3 图结构特征提取模块结构图 Fig. 3 Structure diagram of feature extraction module for graph structure

矩阵会丢失节点自身的特征信息,故对模型中各节点进行自连接处理,包含自连接的邻接矩阵表示为

$$A = A + I_n$$
 .

(3)

式(3)中:A表示包含自连接的邻接矩阵;I_n表示单位矩阵。

信息传递的过程需要保证特征的分布状态不受影响,故进行归一化操作。引入A的度矩阵D,D对 角上的每一个元素的计算公式为

$$\widetilde{\boldsymbol{D}}_{i,i} = \sum_{j=1}^{n} \widetilde{\boldsymbol{A}}_{i,j} \,. \tag{4}$$

则 GCN 的第 l 层的传播方程为

$$h^{(l+1)} = \sigma \left(\widetilde{\boldsymbol{D}}^{-\frac{1}{2}} \widetilde{\boldsymbol{A}} \, \widetilde{\boldsymbol{D}}^{-\frac{1}{2}} h^{(l)} \boldsymbol{\omega}^{(l)} \right)_{\circ}$$
(5)

式(5)中: $h^{(l)}$ 和 $h^{(l+1)}$ 分别为GCN 第l层的输入和输出, 且 $h^{(0)} = V; \omega^{(l)}$ 为GCN 训练的权重参数; $\sigma(\cdot)$ 为GCN 的非线性激活函数, 为了减少模型的计算量, 使用 ReLU 函数。

同样地,在图结构特征提取模块的末端,引入 GAP 层用于处理 GCN 输出的特征图,聚合所有节点特征,最终提取到图结构特征 $F_{\text{ResNet}} \in \mathbf{R}^{\text{C}}$ 。

1.4 特征融合模块

特征融合模块通过捷径分支操作将图像特征提取模块输出的特征图和图结构特征提取模块输出的 特征图进行 Concat 融合。

传统 GCN 模型最终的激活函数采用 Softmax 函数,主要适用于单标签分类问题。为了实现多标 签图像分类任务,将最终的激活函数替换为 Sigmoid 函数。该函数的输出向量的各分量之间没有总和 约束,直接表达了各类别本身的可能性。随着激活函数的更改,损失函数相应替换为二元交叉熵损失函数,其数学表达式为

$$\text{Loss} = -\frac{1}{N} \sum_{I=0}^{N-1} \frac{1}{c} \sum_{a=1}^{c} b_{I,a} \ln(y_{I,a}) + (1 - b_{I,a}) \ln(1 - y_{I,a}) \,. \tag{6}$$

式(6)中:Loss 为二元交叉熵损失函数; N 为焊缝图像数; c 为焊缝缺陷类别数; $b_{I,a}$ 为焊缝图像 I 第 $a \uparrow$ 子标签的真实值; $y_{I,a}$ 为焊缝图像 I 第 $a \uparrow$ 子标签的网络输出经过 Sigmoid 函数的预测值。

2 实验结果与分析

2.1 实验环境

实验采用的操作系统为 Windows 11,处理器为 12th Gen Intel(R) Core(TM) i7-12700H 2.30 GHz,显卡为 NVIDIA GeForce RTX 3060 Laptop GPU,并通过编程语言 Python 3.8 和深度学习框架 Pytorch 2.0.0 进行训练。

将训练图像分辨率统一调整为1 280 px×700 px,以保持输入模型的图像尺寸一致,训练过程中使用的优化器为 Adam,学习率设置为 0.001,批次大小设置为 16,并根据验证结果保存最优的模型参数。

2.2 评价指标

精确率(P)表示真实正样本中被正确分类的样本占所有样本的比例,其计算公式为

$$P = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FP}^{\circ}}$$
(7)

式(7)中:TP 表示真实正样本中被正确分类的样本;FP 表示真实负样本中被错误分类的样本。

召回率(R)表示真实正样本中被正确分类的比例,其计算公式为

$$R = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FN}^{\circ}}$$
(8)

式(8)中:FN 表示真实正样本中被错误分类的样本。

*F*₁ 表示 *P* 和 *R* 的调和平均数,用来衡量分类器的综合性能。*F*₁ 值越大,代表模型性能越好,其计算公式为

$$F_1 = \frac{2 \times P \times R}{P + R} \,. \tag{9}$$

平均精准度(P_A)表示模型在每个类别上的性能表现,其计算公式为

$$P_{\rm A} = \int_0^1 P(R) \,\mathrm{d}R \,\,. \tag{10}$$

均值平均精度(P_{mA})表示 P_A 的平均值,用来衡量模型在所有类别上的性能表现。P_{mA}值越大,代表模型性能越好,其计算公式为

 $P_{\rm mA} = (\sum P_{\rm A})/c_{\circ}$

(11)

(e) 圆形缺陷

选取 P,R,F1 和 PmA 4 种评价方法对焊缝图像多标签分类模型的性能进行评估。

2.3 实验数据集

数据集采用 WELDX 自建数据集和 GDXray 公开数据集^[17]。使用 VIDAR 型工业胶片扫描仪对 真实工业场景中采集的 X 射线焊缝缺陷底片样本进行扫描并转换为数字图像,由此自制了 X 射线焊缝 缺陷 WELDX 数据集。数据集按照行业标准 NB/T 47013.1-2015^[18]将焊缝缺陷分为 5 种类别,分别 是裂纹、未熔合、未焊透、条形缺陷和圆形缺陷,共计1251张图像,其中,裂纹、未熔合和未焊透缺陷尺 寸较大,条形缺陷和圆形缺陷尺寸微小,且各缺陷尺寸大小均不一。经过人工裁剪、筛除不符合要求的 图像后,共获得528 张图像,各图像的分辨率大小不等。使用 LabelImg 软件标注出 X 射线焊缝图像中 缺陷的类别和位置信息,并通过翻转、平移及对比度变化等数据增强方法扩充原始样本,最终获得2112 张X射线焊缝图像。

为了确保训练结果的普遍性和可靠性,将 WELDX 数据集划分为训练集、验证集和测试集,其中, 训练集包含 1 372 张 X 射线焊缝图像,验证集包含 529 张 X 射线焊缝图像,测试集包含 211 张 X 射线 焊缝图像。将 GDXray 数据集作为外部验证集来评估模型在其他焊缝缺陷检测场景中的泛化能力。X 射线焊缝缺陷数据集样本示例,如图4所示。



(a) 裂纹



(b) 未熔合 (c) 未焊透 (d) 条形缺陷 图 4 X射线焊缝缺陷数据集样本示例 Fig. 4 Sample example of X-ray welding defect dataset

2.4 评估实验

为了评估文中算法的有效性,对多种基于不同建模方式的传统算法输出结构进行修改并对比输出 结果,挑选的传统算法包括 ResNet-50, ResNet-101, SqueezeNet^[19], VGG-16^[20], SCConv-R50^[21], Ref-Conv^[22]和 GCN。其中, ResNet-50 和 ResNet-101 分别是 ResNet 算法 50 层和 101 层的网络模型。比 较 8 种不同算法在 WELDX 数据集上的表现,结果如表 1 所示。

表 1 不同传统算法在 WELDX 数据集上的表现对比

Tab. 1	Performance	comparison	of	different	traditional	algorithms	on	WELDX	dataset
--------	-------------	------------	----	-----------	-------------	------------	----	-------	---------

	-	-		
算法	$P/\sqrt[0]{0}$	$R/rac{9}{6}$	$F_1 / \frac{0}{0}$	$P_{ m mA}$ / $\%$
ResNet-50	72.5	57.6	64.2	72.3
ResNet-101	71.7	56.4	63.3	71.4
SqueezeNet	71.6	55.8	62.7	69.7
VGG-16	71.5	56.1	63.1	70.1
SCConv-R50	72.2	56.7	63.5	71.9
RefConv	72.1	57.2	63.8	72.0
GCN	73.3	59.2	65.8	74.5
文中算法	76.7	67.1	72.0	78.1

在传统深度卷积神经网络模型中, ResNet 算法在 WELDX 数据集上的性能表现更加优异, 通过引 入残差模块,该算法能解决随着神经网络深度增加而出现的梯度弥散问题。相比 ResNet-101 算法, ResNet-50 算法的 F_1 值提高了 0.9%, P_{mA} 值提高了 0.9%, 说明 ResNet-50 算法的拟合度更好, 网络层 数更深的模型可能会增加过拟合的风险,从而影响模型的性能。由表1可知: ResNet-50 算法比 SqueezeNet, VGG-16, SCConv-R50, RefConv 算法的 F1 值分别提高了 1.5%, 1.1%, 0.7%, 0.4%, 且 P_{mA} 值分别提高了 2.6%, 2.2%, 0.4%和 0.3%。因此, 文中算法选取 ResNet-50 作为基础网络, 对输入 焊缝图像进行特征提取。

从表1也可以看出,相比其他传统算法,文中算法在 WELDX 数据集上取得了更优的焊缝图像多 标签分类结果;与 ResNet-50 基础网络相比,文中算法的 F_1 和 P_{mA} 分别提高了 7.8%,5.8%,说明采用 图卷积神经网络学习特征节点之间的上下文相似性关系可以帮助网络提升多标签图像分类的性能;与 GCN 相比,文中算法的 F_1 和 P_{mA} 分别提高了 6.2%, 3.6%, 说明采用包含 Res2Net 的 ResNet-50 算法 能够充分发挥其强大的特征提取能力,深入挖掘 X 射线焊缝图像中的细节信息。相比其他传统算法, 文中算法在 WELDX 数据集上的表现(P,R,F_1 和 P_{mA} 4 个评价指标)均有较大提升,说明在焊缝图像 多标签分类任务中,该算法表现出一定的效果。

选取 RMIC^[23], ML-GCN^[24], F-GCN^[25], FAN^[26], CFMIC^[27]和 ViGh^[28]6 种不同的多标签图像分 类算法与文中算法进行对比,进一步评估文中算法的有效性。不同分类算法在 WELDX 数据集上的表 现对比,如表2所示。

RMIC 算法以强化学习的原始多标签问题为基础,融合图像特征与前序标签信息,从而建立新的标 签预测状态。与 RMIC 算法相比,文中算法的 F₁和 P_m分别提高了 3.8%和 1.8%,说明采用图卷积神 经网络构建图结构来学习上下文信息可以取得更好的效果。

ML-GCN 算法利用标签作为节点,标签相关性作为边来构建图结构,边的权重基于标签共现概率, 并通过 GCN 更新图结构。因为加入标签共现数据的信息,在性能上得到较大提升。然而,采用标签共 现关系会使标签类别较少的样本被正确分类的可能性下降,而标签类别较多的样本被正确分类的可能 性上升。文中算法通过 HC 算法和 RKNN 算法在多尺度特征的基础上构建图结构能够增强对图像特 征之间相似性关系的学习, F_1 和 P_{mA} 分别提高了2.5%和1.3%。

Tab. 2 Terrormance com	parison of unferent muit	i label illiage classific	ation algorithms on v	VELDA dataset
算法	$P/rac{0}{2}$	$R/rac{9}{10}$	$F_1 / \frac{9}{10}$	${P}_{ m mA}$ / $\%$
RMIC	72.6	64.2	68.2	76.3
ML-GCN	74.4	65.2	69.5	76.8
F-GCN	75.3	66.7	70.8	77.0
FAN	72.9	66.5	69.7	77.2
CFMIC	76.2	66.8	71.3	77.5
ViGh	76.4	66.9	71.5	77.7

76.7

表 2 不同多标签图像分类算法在 WELDX 数据集上的表现对比

F-GCN 算法基于 GCN 采用多模态分解双线性池化,将图像信息和标签嵌入信息进行融合。该算 法通过端到端方式进行训练,相较于 ML-GCN 算法,更强调标签语义信息和图像特征信息的有效结合, 以促进对图像特征的标签语义引导学习。FAN 在 ML-GCN 基础上引入一种稳健的协方差池化,以汇 总卷积特征,从而形成全局图像表示,捕获图像特征。文中算法引入 RDGNP 算法,针对不同类别提取 的图像特征可以更加有效地提取图结构特征,从而进一步提升模型的性能。由此,相较于 F-GCN 算 法,文中算法的 F_1 和 P_{mA} 分别提高了1.2%和1.1%。相较于FAN算法,文中算法的 F_1 和 P_{mA} 分别提 高了 2.3%和 0.9%。

67.1

72.0

78.1

CFMIC 算法结合注意力机制和 GCN,并引入跨模式融合模块,以捕获局部和全局标签的依赖关 系。尽管该算法取得良好的效果,但是其包含的跨模式融合模块会增加模型的复杂度和规模。相比 CFMIC 算法,文中算法的复杂度更低,训练过程中需要的代价更少,能够更好地满足实际工程应用中实 时性的需求,其 F_1 和 P_{mA} 分别提高了0.7%和0.6%。

ViGh 算法基于输入图像构建图结构,采用注意力机制(HDmA)和 GNN 获取图像的上下文信息, 从而构建全局关系。文中算法采用 GCN 和 RDGNP 算法建立图像特征的上下文关系的同时,使用包 含 Res2Net 的 ResNet-50 提取图像的细节特征信息,两者结合实现图像的多标签分类,丰富特征的表 达能力,与 ViGh 算法相比,文中算法的 F_1 和 P_{mA} 分别提高了 0.5%和 0.4%。

实验表明,文中算法通过结合焊缝图像的多尺度特征和图结构特征,综合考虑特征细节信息和上下 文信息,使模型更加适用于焊缝图像的多标签分类任务,尽管真实工业场景中的焊缝缺陷分类困难,模 型性能依然表现良好。然而,这并不代表文中算法在其他焊缝缺陷检测场景中的可靠性。

https://hdxb. hqu. edu. cn/

文中算法

为了评估文中算法的泛化性,采用文中算法对外部验证集(GDXray)中的图像进行预测,最终得到 F₁和 P_{mA}分别达到 61.5%和 67.1%。虽然 GDXray 数据集是在其他检测场景中利用不同的扫描方式 获得的焊缝图像,但是文中算法也能相对准确地将焊缝缺陷进行分类,证明其具有良好的泛化能力。

2.5 消融实验

为了评估文中算法中不同模块在焊缝图像多标签分类任务中的有效性,在 WELDX 数据集上对文 中算法的不同模块进行消融实验,消融实验结果如表 3 所示。

表 3 文中算法中不同模块在 WELDX 数据集上的消融实验结果

Tab. 3 Ablation experimental results of different modules of proposed algorithm on WELDX dataset

模块	$P/rac{0}{\sqrt{0}}$	$R/rac{0}{2}$	$F_1 / \frac{9}{10}$	${P}_{ m mA}$ / $\%$
ResNet-50	72.5	57.6	64.2	72.3
ResNet-50+Res2Net	71.3	60.8	65.6	74.6
ResNet-50+GCN	74.2	61.9	67.5	75.1
ResNet-50+GCN+RDGNP	75.0	62.5	68.2	76.4
文中算法	76.7	67.1	72.0	78.1

由表 3 可知:当仅使用 ResNet-50 进行特征提取时,由于网络感受野有限,存在忽略图像中微小缺陷的风险,并且只能获取 X 射线焊缝图像的局部信息,而未能捕获全局信息;通过引入 Res2Net 到焊缝 图像的多标签分类网络模型中,特征提取阶段替换了具有不同感受野大小的卷积核,这样,每个卷积核 在粒度级别上更好地捕捉焊缝缺陷的特征信息,有效缓解了焊缝缺陷尺寸微小的问题,因此,该模型在 提取特征时增强了对小目标的敏感程度,从而进一步提高了模型的多标签分类准确率;与仅采用 Res-Net-50 的模型相比,采用 ResNet-50+Res2Net 的模型 F₁ 和 P_{mA}分别提高了大约 1.4%和 2.3%。

添加 Res2Net 模块能够提高网络针对焊缝缺陷的关注程度,然而,对于焊缝图像的特征提取依然缺乏全局相关性的描述,而焊缝缺陷存在形状各异的特点,因此更重要的是,基于预训练 ResNet-50 提取的特征图构建图结构后,引入 GCN 学习图结构的上下文信息,从而提取焊缝图像的全局结构特征。通过融合 ResNet-50 输出的图像特征和 GCN 输出的图结构特征,有效结合 X 射线焊缝图像中的局部关键信息和全局结构信息,使特征表达更加充分准确。与仅采用 ResNet-50 提取图像特征相比,采用多特征融合的模型 F₁ 和 P_{mA}分别提高了大约 3.3%和 2.8%。

在小样本数据集中,一般采用 KNN 算法直接构建图结构,能够更好地理解和学习网络,但 X 射线 焊缝图像中往往包含噪声信息,且焊缝缺陷的分布随机,可能影响模型的稳定性。通过引入 RDGNP 算 法,利用关联度计算方法来强化对构建图结构过程中特征间关系的感知能力,能够更加准确地捕捉特征 之间的相似性关系。相较于 ResNet-50+GCN 初始融合模型,ResNet-50+GCN+RDGNP 模型的 F_1 和 P_{mA} 分别提高了大约 0.7%和 1.3%。

由此可以看出,加入 Res2Net 模块、GCN 模块和 RDGNP 模块均会提升焊缝图像多标签分类的 4 个评价指标,针对性地解决焊缝内部缺陷存在的尺寸微小、结构复杂、分布随机和形状各异等问题,说明 文中算法中的各模块都能促进焊缝图像多标签分类的实现,并且各模块共同作用的效果更为显著,其 中,ResNet-50+GCN 融合模型的性能影响最大。

通过实验明确模型的结构,在图结构重构模块中,针对特征节点的最近邻居节点的数量(k)进行消融实验,目的在于确定合适的最近邻居节点数量,以在特征信息之间实现有效的交换。不同邻居节点数量在 WELDX 数据集上对模型性能的影响,如表 4 所示。

k	$P/\sqrt[0]{0}$	$R/rac{9}{10}$	$F_{1} / \frac{0}{10}$	${P}_{ m mA}$ / $\%$
3	73.0	63.5	67.9	74.7
5	70.8	66.5	68.7	75.4
7	76.7	67.1	72.0	78.1
9	73.4	66.9	70.1	76.8
11	70.5	64.9	67.7	74.2

表 4 不同邻居节点在 WELDX 数据集上对模型性能的影响 Tab. 4 Influence of different neighboring nodes on model performance on WELDX dataset

由表 4 可知:当最近邻居节点的数量 k 为 7 时,模型的性能达到了最佳状态,表明在该配置下,特征 节点之间的信息交流得以最优化,实现了对图结构的有效重构。当邻居节点数量太少时,交换的信息受限,降低了模型的表达能力;而当邻居节点数量过多时,一些无用特征的引入可能会干扰整体学习过程。 因此,在图结构重构模块中将 k 设置为 7,有助于平衡特征信息的交换与噪声的干扰,为模型的整体性 能提供有效的优化策略,以确保 GCN 学习图结构的特征信息前实现更优的重构效果。

3 结论

针对现有传统卷积神经网络只能提取焊缝图像的局部特征,而无法捕获焊缝图像的全局特征进行 有效分类的问题,提出一种多特征融合的焊缝图像多标签分类算法,通过包含 Res2Net 的 ResNet-50 提取焊缝图像的多尺度特征,基于此构建图结构,并引入 RDGNP 算法进一步优化图结构,再利用 GCN 学习图结构蕴含的空间特征,以获取焊缝图像的上下文信息。最后,将卷积神经网络提取的图像特征和 图卷积神经网络提取的图结构特征结合,以预测最终的分类结果。在 X 射线焊缝缺陷 WELDX 数据集 上的实验结果表明,相较于其他算法,文中算法在 4 个评价指标上均优于传统算法,证明其在焊缝图像 多标签分类任务中的有效性,为解决因内部缺陷存在形状各异、尺寸微小、分布随机和结构复杂等特点 导致缺陷难以实现准确分类的问题打下良好的算法基础。

然而,算法仍然存在一些不足,如对于焊缝图像的特征提取还有待进一步提高,数据集的建立需要 进一步扩充等。因此,后续的研究工作将考虑引入注意力机制等增强网络对感兴趣区域的特征表达,收 集更多 X 射线焊缝图像用于网络的训练,以提高焊缝图像多标签分类效果。

参考文献:

- [1] DING Kai, NIU Zhangqi, HUI Jizhuang, et al. A weld surface defect recognition method based on improved Mobile-NetV2 algorithm[J]. Mathematics, 2022, 10(19):3678. DOI:10.3390/math10193678.
- [2] XU Hao, YAN Zhihong, JI Bowen, et al. Defect detection in welding radiographic images based on semantic segmentation methods[J]. Measurement, 2022, 188:110569. DOI:10.1016/j. measurement. 2021.110569.
- [3] SAY D,ZIDI S,QAISAR S M,*et al*. Automated categorization of multiclass welding defects using the X-ray image augmentation and convolutional neural network[J]. Sensors, 2023, 23(14):6422. DOI:10.3390/s23146422.
- [4] KUMARESAN S, AULTRIN K S J, KUMAR S S, et al. Deep learning-based weld defect classification using VGG16 transfer learning adaptive fine-tuning[J]. International Journal on Interactive Design and Manufacturing, 2023,17(6):2999-3010. DOI:10.1007/s12008-023-01327-3.
- [5] TOTINO B,SPAGNOLO F,PERRI S. RIAWELC: A novel dataset of radiographic images for automatic weld defects classification[J]. International Journal of Electrical and Computer Engineering Research, 2023, 3(1):13-17. DOI:10.53375/ijecer. 2023. 320.
- [6] 张智慧,林耀进,张小清,等.基于类别一致性的层次特征选择算法[J]. 闽南师范大学学报(自然科学版),2022,35 (4):41-49. DOI:10.16007/j. cnki. issn2095-7122.2022.04.007.
- [7] BRUNA J,ZAREMBA W,SZLAM A, *et al.* Spectral networks and locally connected networks on graphs[C] // International Conference on Learning Representations. Banff:[s. n.],2014:1-14. DOI:10.48550/arXiv.1312.6203.
- [8] KIPF T N, WELLING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[C]//International Conference on Learning Representations. Toulon: [s. n.], 2017: 1-14. DOI: 10. 48550/arXiv. 1609. 02907.
- [9] WANG Yucheng, GAO Liang, GAO Yiping, et al. A graph guided convolutional neural network for surface defect recognition[J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2022, 19(3):1392-1404. DOI: 10.1109/ tase. 2022. 3140784.
- [10] BALCIOGLU Y S, SEZEN B, ÇERASI C C, et al. Machine design automation model for metal production defect recognition with deep graph convolutional neural network[J]. Electronics, 2023, 12(4): 825. DOI: 10. 3390/electronics12040825.
- [11] 周忠眉,孟威.多角度标签结构和特征融合的多标签特征选择[J]. 闽南师范大学学报(自然科学版),2021,34(1): 64-71. DOI:10.16007/j. cnki. issn2095-7122.2021.01.011.
- [12] HE Kaiming, ZHANG Xiangyu, REN Shaoqing, et al. Deep residual learning for image recognition[C]// Proceed-

ings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Las Vegas: IEEE Press, 2016:770-778. DOI:10.1109/cvpr.2016.90.

- GAO Shanghua, CHENG Mingming, ZHAO Kai, et al. Res2Net: A new multi-scale backbone architecture[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2021, 43(2):652-662. DOI: 10. 1109/TPAMI. 2019. 2938758.
- [14] HAJEBI K, ABBASI-YADKORI Y, SHAHBAZI H, et al. Fast approximate nearest-neighbor search with k-nearest neighbor graph[C]// Proceedings of the Twenty-Second International Joint Conference on Artificial Intelligence. Barcelona: AAAI Press, 2011:1312-1317. DOI:10.5591/978-1-57735-516-8/IJCAI11-222.
- [15] CHEEMA M A, LIN Xuemin, ZHANG Wenjie, et al. Influence zone: Efficiently processing reverse k nearest neighbors queries [C] // IEEE 27th International Conference on Data Engineering. Washington D C: IEEE Press, 2011:577-588. DOI:10.1109/ICDE. 2011.5767904.
- [16] LIU Yongli, ZHAO Congcong, CHAO Hao. Density peak clustering based on relative density under progressive allocation strategy[J]. Mathematical and Computational Applications, 2022, 27(5):84. DOI:10.3390/mca27050084.
- [17] MERY D, RIFFO V, ZSCHERPEL U, et al. GDXray: The database of X-ray images for nondestructive testing[J]. Journal of Nondestructive Evaluation, 2015, 34(4): 42. DOI: 10.1007/s10921-015-0315-7.
- [18] 全国锅炉压力容器标准化技术委员会.承压设备无损检测:NB/T 47013.1-2015[S].北京:新华出版社,2015.
- [19] IANDOLA F N, HAN Song, MOSKEWICZ M W, et al. SqueezeNet: AlexNet-level accuracy with 50x fewer parameters and <0.5 MB model size[C] // International Conference on Learning Representations. Toulon: [s. n.], 2017:1-13. DOI:10.48550/arXiv.1602.07360.</p>
- [20] SIMONYAN K, ZISSERMAN A. Very deep convolutional networks for large-scale image recognition [EB/OL]. (2015-04-10) [2024-02-10]. https://doi.org/10.48550/arXiv.1409.1556.
- [21] LI Jiafeng, WEN Ying, HE Lianghua. SCConv: Spatial and channel reconstruction convolution for feature redundancy[C]// Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Vancouver: IEEE Press, 2023;6153-6162. DOI:10.1109/cvpr52729.2023.00596.
- [22] CAI Zhicheng, DING Xiaohan, SHEN Qiu, et al. Refconv: Re-parameterized refocusing convolution for powerful convnets[C]//International Conference on Learning Representations. Vienna: [s. n.], 2024: 1-17. DOI: 10. 48550/ arXiv. 2310. 10563.
- [23] HUANG Xun, BELONGIE S. Arbitrary style transfer in real-time with adaptive instance normalization[C]// Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision. Venice: IEEE Press, 2017:1501-1510. DOI:10. 1109/iccv. 2017. 167.
- [24] CHEN Zhaoming, WEI Xiushen, WANG Peng, et al. Multi-label image recognition with graph convolutional networks[C]//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Long Beach: IEEE Press, 2019:5177-5186. DOI:10.1109/cvpr. 2019.00532.
- [25] WANG Yangtao, XIE Yanzhao, LIU Yu, et al. Fast graph convolution network based multi-label image recognition via cross-modal fusion[C]// Proceedings of the 29th ACM International Conference on Information & Knowledge Management, New York: ACM, 2020:1575-1584. DOI:10.1145/3340531.3411880.
- [26] LI Yaning, YANG Liu. More correlations better performance: Fully associative networks for multi-label image classification[C] // 25th International Conference on Pattern Recognition. Milan: IEEE Press, 2021: 9437-9444. DOI:10.1109/icpr48806.2021.9412004.
- [27] WANG Yangtao, XIE Yanzhao, ZENG Jiangfeng, et al. Cross-modal fusion for multi-label image classification with attention mechanism[J]. Computers and Electrical Engineering, 2022, 101:108002. DOI: 10.1016/j. compeleceng. 2022.108002.
- [28] PANG Wenkai, TAN Zhi. A steel surface defect detection model based on graph neural networks[J]. Measurement Science and Technology, 2024, 35(4):046201. DOI:10.1088/1361-6501/adlc4b.

(责任编辑:黄晓楠 英文审校:陈婧)

DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 202307024

非局部 Gray-Scott 模型的 二阶线性化差分格式



陈心妍,张馨心,蔡耀雄

(华侨大学 数学科学学院, 福建 泉州 362021)

摘要: 研究周期边界条件下的非局部 Gray-Scott 模型,提出一种高效数值格式。基于算子分裂思想将原问题拆分为线性非局部子问题和非线性子问题。对于线性非局部子问题,结合复化梯形公式和 Crank-Nicolson 公式,建立时空二阶差分格式;对于非线性子问题,结合 Crank-Nicolson 公式及 Rubin-Graves 线性化技术,建 立线性求解格式。结果表明:非局部 Gray-Scott 模型的二阶线性化差分格式具有稳定性、收敛性及有效性。 关键词: 非局部 Gray-Scott 模型;算子分裂;稳定性;有效性

中图分类号: O 241.8 文献标志码: A 文章编号: 1000-5013(2024)04-0524-10

Second-Order Linearized Difference Scheme for Nonlocal Gray-Scott Model

CHEN Xinyan, ZHANG Xinxin, CAI Yaoxiong

(School of Mathematical Sciences, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China)

Abstract: An efficient numerical scheme is proposed by studying the nonlocal Gray-Scott model under periodic boundary conditions. Based on the idea of operator splitting, the original problem is divided into a linear nonlocal subproblem and a nonlinear subproblem. To linear nonlocal subproblem, a spatiotemporal second-order difference scheme is established by combining the complex trapezoidal formula and Crank Nicholson formula. To nonlinear subproblem, a linear solution format is established by combining Crank Nicholson formula and Rubin Graves linearization technique. The results show that the second-order linearized difference scheme of the nonlocal Gray-Scott model is stable, convergent and efficient.

Keywords: nonlocal Gray-Scott model; operator splitting; stability; effectiveness

Gray-Scott(GS)模型是反应-扩散系统的重要组成部分,反应-扩散系统在自然界和工业生产中广 泛存在,如化学反应的燃烧、生物体内的代谢过程、气体和液体中的化学反应等都属于反应扩散系统。 GS模型是 Gray 和 Scott^[1]于 1984 年提出,用来描述反映器中浓度时空变化的耦合模型。由于该模型 可以描述斑点、条纹等有趣的时空结构,被广泛应用于化学^[2-5]、生物^[6-9]等领域。整数阶 GS 模型为

$$u_{t} = \mu_{u} \Delta u - uv^{2} + F(1-u),$$

$$v_{t} = \mu_{v} \Delta v + uv^{2} - (F+\kappa)v.$$
(1)

式(1)中:u,v为浓度; $\mu_u > 0, \mu_v > 0$ 为扩散速率; $F \ge 0$ 为进料速率; $\kappa \ge 0$ 为第2次反应的衰减速率。 然而,随着对含奇性问题的深入研究,人们发现非局部扩散系统比局部扩散系统可以更准确地描述

收稿日期: 2023-07-22

通信作者: 蔡耀雄(1979-),男,讲师,主要从事偏微分方程数值解及理论的研究。E-mail:cai_yx@126.com。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11701196);福建省自然科学基金资助项目(2020J01074,2021J01306)
生物演化状态。非局部算子避免对变量进行空间求导,降低了解的正则性要求,从而可以方便地用于模 拟非连续的物理现象。

非局部 GS 模型为

$$u_{t} = -\mu_{u}L_{\delta}u - uv^{2} + F(1-u), \qquad (x,t) \in \Omega \times (0,T], \\ v_{t} = -\mu_{v}L_{\delta}v + uv^{2} - (F+\kappa)v, \qquad (x,t) \in \Omega \times (0,T]_{\circ}$$

$$(2)$$

初值条件和边界条件为

 $u(x,0) = u_0(x), \quad v(x,0) = v_0(x), \quad x \in \Omega_{\circ}$

式(2)中: $\Omega = [-L, L]$ 为有界区域; L_{δ} 为非局部算子,定义^[10]为 $L_{\delta}u(x) = \int_{\Omega} J_{\delta}(x - y) [u(x) - u(x)] dx$ u(y)]dy, $\forall x \in \Omega$ 。其中卷积核 J_{δ} 满足:1) $J_{\delta}(x) \ge 0$, $\forall x \in \Omega$;2) $J_{\delta}(x-y) = J_{\delta}(y-x)$;3) J_{δ} 是以 Ω 为周期的周期函数。

由于 GS 模型为非线性耦合方程组,在数值求解和理论研究中存在一定困难,许多学者致力于这一 方面的研究。Pearson^[11]对模型进行一系列数值模拟后,发现其非常数正解存在极其复杂的结构。Mc-Gough 等^[12]证实了以上结论,并且给出所有非负常数解的稳定性和相应的先验估计。Zhang 等^[13]利用 向后差分法和时间上的线性外推法,建立 GS 模型的二阶格式,并对其进行理论分析和数值模拟。Peng 等[14]对 GS 模型在有界域上的平衡点问题进行研究,得到了关于非常数正平衡点不存在性的若干结论。 在扩散率 ε 的极限下, Chen 等^[15]利用混合渐近算法, 对二维 GS 模型多点拟平衡模式的动态特性及稳 定性机制进行了深入研究。Wang 等^[16]给出了空间延拓 GS 模型的噪声控制模式的时间演化。

然而,相比于经典 GS 模型,非局部 GS 模型的研究结果较少。已有的非局部 GS 模型的数值解研 究主要是以分数阶拉普拉斯算子[17-19]为基础,因此,本文利用正定卷积算子对其进行研究。

1 数值格式

考虑在一维区域 $\Omega = [-L,L]$ 上的全离散格式。为了方便进行离散,引入时间步长 $\tau = T/M$ 和空 间网格 $\Omega_h = \{x_i = -L + ih, 0 \leq i \leq N-1\}$ 。其中:空间剖分为 N,空间步长 h = 2L/N。给定正整数 M, 时间节点为 $t_m = m\tau, m = 0, 1, \dots, M$ 。在 Ω_h 上定义的所有周期网格函数由 M_h 表示,即 $M_h = \{U | U = \{u_i\}$ $|0 \leq i \leq N-1\rangle$ }。 u_i^m 和 $u(x_i, t_m)$ 分别代表数值解和精确解。

1.1 非局部算子的离散格式

对任意函数 u,给定非局部算子 L_a,定义为

$$L_{\delta}u = (J_{\delta} * 1)u - J_{\delta} * u_{\circ}$$

$$\exists \mathfrak{U}, L_{\delta}u \stackrel{*}{=} (J_{\delta} * 1)_{i} u_{i}^{m} - (J_{\delta} * u)_{i}^{m} \circ \qquad (3)$$

$$\exists (3) \oplus : (J_{\delta} * 1)_{i} = \int_{-L}^{L} J_{\delta}(x_{i} - y) dy; (J_{\delta} * u)_{i} = \int_{-L}^{L} J_{\delta}(x_{i} - y) u(y) dy \circ \qquad (3)$$

$$\exists (3) \oplus : (J_{\delta} * 1)_{i} = \int_{-L}^{L} J_{\delta}(x_{i} - y) dy; (J_{\delta} * u)_{i} = \int_{-L}^{L} J_{\delta}(x_{i} - y) u(y) dy \circ \qquad (3)$$

$$\exists J_{\delta} * u \stackrel{*}{=} df_{\delta} \stackrel{*}{=} L_{\delta} (x_{i} - y) u(y) dy = \int_{-L}^{L} J_{\delta}(x_{i} - y) u(y) dy + \int_{y_{1}}^{y_{2}} J_{\delta}(x_{i} - y) u(y) dy + \cdots + \int_{y_{N-1}}^{y_{N}} J_{\delta}(x_{i} - y) u(y) dy = \int_{y_{0}}^{y_{1}} J_{\delta}(x_{i} - y) u(y) dy + \int_{y_{1}}^{y_{2}} J_{\delta}(x_{i} - y) u(y) dy + \cdots + \int_{y_{N-1}}^{y_{N}} J_{\delta}(x_{i} - y) u(y) dy = \frac{h}{2} [J_{\delta}(x_{i} - y_{0}) u_{0} + J_{\delta}(x_{i} - y_{1}) u_{1}] + \frac{h}{2} [J_{\delta}(x_{i} - y_{1}) u_{1} + J_{\delta}(x_{i} - y_{2}) u_{2}] + \cdots + \frac{h}{2} [J_{\delta}(x_{i} - y_{0}) u_{0} + h \sum_{j=1}^{N-1} J_{\delta}(x_{i} - y_{N}) u_{N}] + O(h^{2}) = \frac{h}{2} J_{\delta}(x_{i} - y_{0}) u_{0} + h \sum_{j=1}^{N-1} J_{\delta}(x_{i} - y_{j}) u_{j} + \frac{h}{2} J_{\delta}(x_{i} - y_{N}) u_{N} + O(h^{2}) \circ (4)$$

同理可得

式(

$$(J_{\delta} * 1)_{i} u_{i}^{m} = \left[\frac{h}{2} J_{\delta}(x_{i} - y_{0}) + h \sum_{j=1}^{N-1} J_{\delta}(x_{i} - y_{j}) + \frac{h}{2} J_{\delta}(x_{i} - y_{N})\right] u_{i}^{m} + O(h^{2})_{\circ}$$
(5)

因此,结合式(4)和式(5),在周期边界条件下对任意的 N 阶列向量 $U = (u_0, u_1, \dots, u_{N-2}, u_{N-1})^T$,有 全离散形式如下

$$L_{\delta}^{h} \mathbf{U} = -h \begin{pmatrix} *_{1} + \frac{1}{2} J_{\delta}(Nh) & J_{\delta}(h) & J_{\delta}(2h) & \cdots & J_{\delta}((N-1)h) \\ \frac{1}{2} J_{\delta}(Nh) + \frac{1}{2} J_{\delta}((N-1)h) & *_{2} & J_{\delta}(h) & \cdots & J_{\delta}((N-2)h) \\ \frac{1}{2} J_{\delta}(Nh) + \frac{1}{2} J_{\delta}((N-2)h) & J_{\delta}(h) & *_{3} & \cdots & J_{\delta}((N-3)h) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{2} J_{\delta}((N-1)h) + \frac{1}{2} J_{\delta}(h) & J_{\delta}((N-2)h) & J_{\delta}((N-3)h) & \cdots & *_{N} \end{pmatrix}$$

 $(u_0, u_1, \cdots, u_{N-2}, u_{N-1})^{\mathrm{T}} = AU_{\circ}$

式(6)中:*;值为所在行其余值和的相反数,如

$$*_{1} = -(J_{\delta}(h) + J_{\delta}(2h) + \dots + J_{\delta}((N-1)h) + \frac{1}{2}J_{\delta}(Nh)).$$

注1 由文献[20]可知,非局部离散算子 L^b 是半正定和自伴的。

1.2 算子分裂法求解非局部 GS 方程

算子分裂方法的思想是将一个较为复杂的问题分解为几个简单的子问题进行处理。采用二阶对称的 Strang 分裂方法^[21]求解非局部 GS 模型。首先,将原始问题分解为线性非局部子问题

$$\begin{array}{l} u_{\iota} = -\mu_{u} L_{\delta} u - F u, \\ v_{\iota} = -\mu_{v} L_{\delta} v - (F + \kappa) v, \end{array}$$

$$(7)$$

和非线性子问题

$$\begin{array}{c} u_t = -uv^2 + F, \\ v_t = uv^2 \\ \end{array}$$

$$(8)$$

记 S_A和 S_B分别为上述线性非局部子问题和非线性子问题的解算子。

基于二阶 Strang 算子分裂方法,给定时间步长 r,非局部 GS 模型可通过以下方式近似求解,即

$$\boldsymbol{\theta}(x,t+\tau) \approx S_{\mathrm{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right) S_{\mathrm{B}}(\tau) S_{\mathrm{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right) \boldsymbol{\theta}(x,t) \,. \tag{9}$$

式(9)中: $\boldsymbol{\theta} = (u, v)^{\mathrm{T}}$ 。

1.2.1 非局部线性系统的数值逼近 $S_A \rightarrow S_A^{*h}$ 结合式(6)和 C-N 格式,可得线性子问题(7)的全离散格式为

$$\left(\frac{u_i^{m+1}-u_i^m}{\tau} = -\mu_u L_{\delta}^h u_i^{m+\frac{1}{2}} - F u_i^{m+\frac{1}{2}}, \\ \frac{v_i^{m+1}-v_i^m}{\tau} = -\mu_v L_{\delta}^h v_i^{m+\frac{1}{2}} - (F+\kappa) v_i^{m+\frac{1}{2}}\right)$$

令 $L^h_{\delta} U^m = A U^m$, $L^h_{\delta} V^m = A V^m$ 。其中, U^m 与 V^m 分别定义为

$$U^{m} = \{ u_{i}^{m} \mid 0 \leqslant i \leqslant N-1 \} \in M_{h} ,$$
$$V^{m} = \{ v_{i}^{m} \mid 0 \leqslant i \leqslant N-1 \} \in M_{h} .$$

因此,有

$$\begin{cases} \frac{U^{m+1} - U^m}{\tau} = -\frac{1}{2} \mu_u (AU^{m+1} + AU^m) - \frac{1}{2} F(U^{m+1} + U^m), \\ \frac{V^{m+1} - V^m}{\tau} = -\frac{1}{2} \mu_v (AV^{m+1} + AV^m) - \frac{1}{2} (F + \kappa) (V^{m+1} + V^m) \end{cases}$$

通过分离变量法,可得(U^{m+1} , V^{m+1})^T为

$$\boldsymbol{U}^{m+1} = \left(\boldsymbol{I} + \frac{\tau}{2}\mu_{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{A} + \frac{\tau}{2}F\boldsymbol{I}\right)^{-1} \left(\boldsymbol{I} - \frac{\tau}{2}\mu_{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{A} - \frac{\tau}{2}F\boldsymbol{I}\right)\boldsymbol{U}^{m},$$

$$\boldsymbol{V}^{m+1} = \left(\boldsymbol{I} + \frac{\tau}{2}\mu_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{A} + \frac{\tau}{2}(F + \boldsymbol{\kappa})\boldsymbol{I}\right)^{-1} \left(\boldsymbol{I} - \frac{\tau}{2}\mu_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{A} - \frac{\tau}{2}(F + \boldsymbol{\kappa})\boldsymbol{I}\right)\boldsymbol{V}^{m},$$
(10)

https://hdxb. hqu. edu. cn/

2024 年

引理1 对于任意网格函数 $\boldsymbol{\psi} = \{(u_i, v_i)^T \mid 0 \leq i \leq N-1\}, f$ $\parallel S_{\Lambda}^{\tau,h} \boldsymbol{\psi} \parallel \leq \parallel \boldsymbol{\psi} \parallel$ 。

其中: $\|\boldsymbol{\psi}\|^2 = h^2 \sum_{0 \leq i \leq N-1} (u_i^2 + v_i^2)$ 。

证明:根据式(1)和注1可知, μ_u , μ_v ,F和 κ 均为正数, L^h_δ 为半正定算子,因此

$$\left(\boldsymbol{I}+\frac{\tau}{2}\mu_{u}\boldsymbol{A}+\frac{\tau}{2}F\boldsymbol{I}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{I}-\frac{\tau}{2}\mu_{u}\boldsymbol{I}-\frac{\tau}{2}F\boldsymbol{I}\right)\Big\|_{2} \leqslant 1,$$

且.

$$\left\| \left(\boldsymbol{I} + \frac{\tau}{2} \mu_{v} \boldsymbol{A} + \frac{\tau}{2} (F + \kappa) \boldsymbol{I} \right)^{-1} \left(\boldsymbol{I} - \frac{\tau}{2} \mu_{v} \boldsymbol{A} - \frac{\tau}{2} (F + \kappa) \boldsymbol{I} \right) \right\|_{2} \leq 1.$$

上式中: $\|\cdot\|_{2}$ 为谱范数。使用 Parseval 公式,可得 $\|U^{m+1}\| \leq \|U^{m}\|, \|V^{m+1}\| \leq \|V^{m}\|,$ 即证。 1.2.2 非线性系统的数值逼近 $S_{B} \rightarrow S_{B}^{*,h}$ 讨论非线性子问题式(8),针对第 1 个式子,基于 C-N 格式可 建立表达式为

$$\frac{u_i^{m+1}-u_i^m}{\tau} = -\frac{(u_i v_i^2)^{m+1} + (u_i v_i^2)^m}{2} + F_{\circ}$$

采用 R-G 线性化^[22]方法,定义

$$(uv^2)^{m+1} = u^{m+1}(v^m)^2 + 2u^m v^m v^{m+1} - 2u^m v^m v^m$$
.

同理,对式(8)的第2个公式也做如上处理,可得非线性子问题的全离散格式如下

$$\frac{u_{i}^{m+1} - u_{i}^{m}}{\tau} = -\frac{1}{2} (v_{i}^{m})^{2} u_{i}^{m+1} + \frac{1}{2} (v_{i}^{m})^{2} u_{i}^{m} - u_{i}^{m} v_{i}^{m} v_{i}^{m+1} + F,
\frac{v_{i}^{m+1} - v_{i}^{m}}{\tau} = -\frac{1}{2} (v_{i}^{m})^{2} u_{i}^{m} + \frac{1}{2} (v_{i}^{m})^{2} u_{i}^{m+1} + u_{i}^{m} v_{i}^{m} v_{i}^{m+1} .$$
(11)

通过分离变量方法,将模型进一步化简为

$$\begin{cases} \left(1 + \frac{(v_i^m)^2}{2}\tau\right)u_i^{m+1} + \tau u_i^m v_i^m v_i^{m+1} = u_i^m + \frac{u_i^m (v_i^m)^2}{2}\tau + F\tau, \\ \left(\left(-\frac{(v_i^m)^2}{2}\tau\right)u_i^{m+1} + (1 - \tau u_i^m v_i^m)v_i^{m+1} = v_i^m - \frac{u_i^m (v_i^m)^2}{2}\tau. \end{cases} \end{cases}$$

可得矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{(v_i^m)^2}{2} \tau & \tau u_i^m v_i^m \\ -\frac{(v_i^m)^2}{2} \tau & 1 - \tau u_i^m v_i^m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i^{m+1} \\ v_i^{m+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{(v_i^m)^2}{2} \tau & 0 \\ 0 & 1 - \frac{u_i^m v_i^m}{2} \tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i^m \\ v_i^m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F\tau \\ 0 \end{pmatrix},$$
(12)

采用"冻结系数"方法^[23]研究格式(11)的稳定性,冻结(v^m)²和 u^mv^m 两项,并将其定义为常数,即

$$\theta_1 := \max_{0 \le m \le M 0 \le i \le N-1} \{(v_i^m)^2\},\\ \theta_2 := \max_{0 \le m \le M 0 \le i \le N-1} \{u_i^m, v_i^m\}.$$

那么,式(12)可以表示为

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{K}_{i}^{m+1} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{K}_{i}^{m} + \boldsymbol{R}_{\circ}$$
(13)

式(13)中:

$$\boldsymbol{K}_{i}^{m} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_{i}^{m} \\ \boldsymbol{v}_{i}^{m} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{\tau}{2}\theta_{1} & \tau\theta_{2} \\ -\frac{\tau}{2}\theta_{1} & 1 - \tau\theta_{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{\tau}{2}\theta_{1} & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\tau}{2}\theta_{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} F\tau \\ 0 \end{pmatrix}.$$

当 $1-\tau\theta_2+\frac{\tau}{2}\theta_1\neq 0$ 时,矩阵**P**可逆,则

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q} = \frac{1}{1 - \tau\theta_2 + \frac{\tau}{2}\theta_1} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\tau}{2}\theta_1 - \tau\theta_2 - \frac{\tau^2}{2}\theta_1\theta_2 & -\tau\theta_2\left(1 - \frac{\tau}{2}\theta_2\right) \\ \frac{\tau}{2}\theta_1\left(1 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right) & 1 - \frac{\tau}{2}\theta_2 + \frac{\tau}{2}\theta_1 - \frac{\tau^2}{4}\theta_1\theta_2 \end{pmatrix},$$

\$

$$\begin{cases} g_{11} = 1 + \frac{\tau}{2}\theta_1 - \tau\theta_2 - \frac{\tau^2}{2}\theta_1\theta_2, & g_{12} = -\tau\theta_2\left(1 - \frac{\tau}{2}\theta_2\right), \\ g_{21} = \frac{\tau}{2}\theta_1\left(1 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right), & g_{22} = 1 - \frac{\tau}{2}\theta_2 + \frac{\tau}{2}\theta_1 - \frac{\tau^2}{4}\theta_1\theta_2, \end{cases}$$

可得

$$(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q}) = \frac{1}{\left(1 - \tau\theta_{2} + \frac{\tau}{2}\theta_{1}\right)^{2}} \begin{pmatrix} g_{11}^{2} + g_{21}^{2} & g_{11}g_{12} + g_{21}g_{22} \\ g_{11}g_{12} + g_{21}g_{22} & g_{12}^{2} + g_{22}^{2} \end{pmatrix}^{\circ}$$

假设

$$\tau \leqslant \frac{1}{|\theta_1 - 2\theta_2|},\tag{14}$$

则存在常数 C1, 使得

$$\begin{aligned} \frac{g_{11}^2 + g_{21}^2 + |g_{11}g_{12} + g_{21}g_{22}|}{\left(1 - \tau\theta_2 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2} &\leqslant \frac{g_{11}^2 + g_{21}^2 + |g_{11}g_{12}| + |g_{21}g_{22}|}{\left(1 - \tau\theta_2 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2} = \\ & \left(1 - \frac{\frac{\tau^2}{2}\theta_1\theta_2}{1 + \tau\left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)}\right)^2 + \frac{\tau^2}{4} \frac{\theta_1^2 \left(1 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2}{\left(1 + \tau\left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)\right)^2} + \\ & \tau \left|\frac{\theta_2 \left(1 - \frac{\tau}{2}\theta_2\right)}{1 + \tau\left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)}\right| \cdot \left|1 - \frac{\frac{\tau}{2}\theta_1\theta_2}{1 + \tau\left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)}\right| + \\ & \frac{\tau}{2} \left|\frac{\theta_1 \left(1 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1 + \tau\left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)}\right| \cdot \left|1 + \frac{\frac{\tau}{2}\theta_2 \left(1 - \frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1 + \tau\left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)}\right| \leqslant 1 + C_1\tau \end{aligned}$$

和

$$\begin{split} \frac{|g_{11}g_{12} + g_{21}g_{22}| + g_{12}^2 + g_{22}^2}{\left(1 - \tau\theta_2 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2} &\leqslant \frac{|g_{11}g_{12}| + |g_{21}g_{22}| + g_{12}^2 + g_{22}^2}{\left(1 - \tau\theta_2 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right)^2} = \\ \tau \left| \frac{\theta_2 \left(1 - \frac{\tau}{2}\theta_2\right)}{1 + \tau \left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)} \right| \cdot \left| 1 - \frac{\frac{\tau}{2}\theta_1\theta_2}{1 + \tau \left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)} \right| + \\ \frac{\tau}{2} \left| \frac{\theta_1 \left(1 + \frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1 + \tau \left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)} \right| \cdot \left| 1 + \frac{\frac{\tau}{2}\theta_2 \left(1 - \frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1 + \tau \left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)} \right| + \\ \tau^2 \left| \frac{\theta_2^2 \left(1 - \frac{\tau}{2}\theta_2\right)^2}{\left(1 + \tau \left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)\right)^2} + \left(1 + \frac{\frac{\tau}{2}\theta_2 \left(1 - \frac{\tau}{2}\theta_1\right)}{1 + \tau \left(\frac{\theta_1}{2} - \theta_2\right)} \right) \right|^2 \leqslant 1 + C_1 \tau. \end{split}$$

结合上述不等式,有

$$\| \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q} \|_{2}^{2} \leqslant \| (\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q})^{\mathsf{T}} (\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q}) \|_{\infty} \leqslant 1 + C_{1}\tau_{\circ}$$

$$\tag{15}$$

式(15)中: $\|P\|_{\infty}$ 是P的 ∞ -范数。

结合式(13)和式(15),有引理2。

引理2 在式(14)条件下,对于任意网格函数 $\psi = \{(u_i, v_i)^T | 0 \leq i \leq N-1\}, f$

$$\|S_{\mathrm{B}}^{\tau,h}\boldsymbol{\psi}\| \leqslant \sqrt{1+C_{1}\tau} \|\boldsymbol{\psi}\|_{\circ}$$

因此,对于问题(2),结合式(9)~(11),可得二阶算子分裂格式为

$$\boldsymbol{U}^{*} = \left(\boldsymbol{I} + \frac{\tau}{4}\mu_{u}\boldsymbol{A} + \frac{\tau}{4}F\boldsymbol{I}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{I} - \frac{\tau}{4}\mu_{u}\boldsymbol{A} - \frac{\tau}{4}F\boldsymbol{I}\right)\boldsymbol{U}^{m},$$

$$\boldsymbol{V}^{*} = \left(\boldsymbol{I} + \frac{\tau}{4}\mu_{v}\boldsymbol{A} + \frac{\tau}{4}(F+\kappa)\boldsymbol{I}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{I} - \frac{\tau}{4}\mu_{v}\boldsymbol{A} - \frac{\tau}{4}(F+\kappa)\boldsymbol{I}\right)\boldsymbol{V}^{m},$$

$$\frac{\boldsymbol{U}^{**} - \boldsymbol{U}^{*}}{\tau} = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{V}^{*})^{2}\boldsymbol{U}^{**} + \frac{1}{2}(\boldsymbol{V}^{*})^{2}\boldsymbol{U}^{*} - \boldsymbol{U}^{*}\boldsymbol{V}^{*}\boldsymbol{V}^{**} + \boldsymbol{F}^{*},$$

$$\frac{\boldsymbol{V}^{**} - \boldsymbol{V}^{*}}{\tau} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{V}^{*})^{2}\boldsymbol{U}^{**} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{V}^{*})^{2}\boldsymbol{U}^{*} + \boldsymbol{U}^{*}\boldsymbol{V}^{*}\boldsymbol{V}^{**},$$

$$U^{m+1} = \left(\boldsymbol{I} + \frac{\tau}{4}\mu_{u}\boldsymbol{A} + \frac{\tau}{4}F\boldsymbol{I}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{I} - \frac{\tau}{4}\mu_{u}\boldsymbol{A} - \frac{\tau}{4}F\boldsymbol{I}\right)\boldsymbol{U}^{**},$$

$$\boldsymbol{V}^{m+1} = \left(\boldsymbol{I} + \frac{\tau}{4}\mu_{v}\boldsymbol{A} + \frac{\tau}{4}(F+\kappa)\boldsymbol{I}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{I} - \frac{\tau}{4}\mu_{v}\boldsymbol{A} - \frac{\tau}{4}(F+\kappa)\boldsymbol{I}\right)\boldsymbol{V}^{**}.$$
(16)

式(16)中: $\mathbf{F}^* = F(1, \dots, 1)^T, (\mathbf{U}^*, \mathbf{V}^*) \mathbf{a}(\mathbf{U}^{**}, \mathbf{V}^{**})$ 是中间变量。

根据式(9),算法(16)还可以表示为 $\boldsymbol{\Phi}^{m+1} = S_A^{\frac{\tau}{2},h} S_B^{\frac{\tau}{2},h} S_A^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^m$ 。其中: $\boldsymbol{\Phi}^m = (\boldsymbol{U}^m, \boldsymbol{V}^m)^T$ 为时间 t_m 的数 值解, $S_A^{\frac{\tau}{2},h}$ 和 $S_B^{\frac{\tau}{2},h}$ 分别为节 1.2.1和节 1.2.2给出的 S_A 和 S_B 的数值近似。

注 2 在条件(14)下,很容易验证矩阵 **P**的行列式满足 $|\mathbf{P}| = 1 - \tau \theta_2 + \frac{\tau}{2} \theta_1 \in \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$,因此,**P**为可逆矩阵。

2 稳定性和收敛性理论分析

定义映射 $I^h: L^2_{per}(\Omega) \rightarrow M_h$,其中, $L^2_{per}(\Omega) = \{u \mid u \in L^2(\Omega), u \in \Omega | n \in \Omega \}$ 。

2.1 稳定性分析

定理1 在条件(14)下,关于问题(2)的二阶算子分裂格式(16)是稳定的,有

$$\|\boldsymbol{\Phi}^{m+1}\| \leqslant \mathrm{e}^{\frac{C_1T}{2}} \|\boldsymbol{\Phi}^0\|_{\circ}$$
(17)

证明:由引理1和引理2,有

$$\| \boldsymbol{\Phi}^{m+1} \| = \| S_{\mathbb{A}}^{\frac{\tau}{2},h} S_{\mathbb{B}}^{r,h} S_{\mathbb{A}}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} \| \leqslant \| S_{\mathbb{B}}^{r,h} S_{\mathbb{A}}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} \| \leqslant \sqrt{1 + C_{1}\tau} \| S_{\mathbb{A}}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} \| \leqslant \sqrt{1 + C_{1}\tau} \| S_{\mathbb{A}}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} \| \leqslant e^{\frac{C_{1}T}{2}} \| \boldsymbol{\Phi}^{0} \| .$$

定理证毕。

2.2 收敛性分析

假设非局部 GS 模型(2)在周期边界条件下的解 u(x,t)和 v(x,t)满足正则性假设

 $u(x,t) \in H^{3}(0,T; H^{s}_{per}(\Omega)), \quad v(x,t) \in H^{3}(0,T; H^{s}_{per}(\Omega)), \quad s > 1.$ (18) 为了证明收敛性,需要引理 3.

引理3 对于任意函数 $u, v \in H^3(0, T; H^2_{per}(\Omega)), 有 \parallel I^h S_A(\tau) \theta - S_A^{\tau,h} I^h \theta \parallel \leq C_2 \tau(\tau^2 + h^2)$ 。其中: $\theta = (u, v)^T, C_2$ 是与 τ 和 h 无关的正常数。

证明:由于式(10)是基于时间上的二阶 C-N 格式和空间上的二阶梯形公式得到的,因此,可得引理 3 的结论。

引理4 对于任意函数 *u*,*v*∈ *H*³(0,*T*;*L*²(Ω)),有

 $\| I^h S_{\mathrm{B}}(\tau) \boldsymbol{\theta} - S_{\mathrm{B}}^{\tau,h} I^h \boldsymbol{\theta} \| \leqslant C_3 \tau^3 \, .$

其中:C₃ 是与 τ 和 h 无关的正常数。

证明:由于式(11)是基于时间上的二阶 C-N 格式与二阶 R-G 线性化得到的,因此可得引理 4。

定义 $\hat{\boldsymbol{\theta}}(x,t) = (\hat{u}(x,t), \hat{v}(x,t))^{\mathrm{T}}$ 为方案(9)的精确解。因此,可以得到收敛性结论如下。

定理 2 设 $u^m = (u(t_m), v(t_m))^T$ 和 $\Phi^m = (U^m, V^m)^T$ 分别是问题(2)和算法(16)在 t_m 处的解。在式 (14)与式(18)给出的正则性条件下,有

 $\| \boldsymbol{\Phi}^{m+1} - I^h \boldsymbol{u}^{m+1} \| \leq C(\tau^2 + h^2)_{\circ}$

证明:对于 m≥0,有

$$\| \boldsymbol{\Phi}^{m+1} - I^{h} \boldsymbol{u}^{m+1} \| \leq \| \boldsymbol{\Phi}^{m+1} - I^{h} \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m+1} \| + \| I^{h} \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m+1} - I^{h} \boldsymbol{u}^{m+1} \| .$$
(19)

由文献[10],可得

$$\| I^{h} \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m+1} - I^{h} \boldsymbol{u}^{m+1} \| \leqslant C_{4} \tau^{2} \, . \tag{20}$$

式(20)中:C₄>0为常数。

根据引理1和引理3,式(19)右边的第1项满足

$$\| \boldsymbol{\Phi}^{m+1} - I^{h} \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m+1} \| = \| S_{A}^{\frac{\tau}{2},h} S_{B}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} - I^{h} S_{A} \left(\frac{\tau}{2}\right) S_{B}(\tau) S_{A} \left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| \leq \\ \| S_{A}^{\frac{\tau}{2},h} S_{B}^{\frac{\tau}{2},h} S_{A}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} - S_{A}^{\frac{\tau}{2},h} I^{h} S_{B}(\tau) S_{A} \left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| + \\ \| S_{A}^{\frac{\tau}{2},h} I^{h} S_{B}(\tau) S_{A} \left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} - I^{h} S_{A} \left(\frac{\tau}{2}\right) S_{B}(\tau) S_{A} \left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| \leq \\ \| S_{B}^{\frac{\tau}{2},h} S_{A}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} - I^{h} S_{B}(\tau) S_{A} \left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| + C_{2} \tau (\tau^{2} + h^{2}) \,.$$

$$(21)$$

根据引理2和引理4,可得

$$\| S_{\mathrm{B}}^{\mathfrak{r},h} S_{\mathrm{A}}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} - I^{h} S_{\mathrm{B}}(\tau) S_{\mathrm{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| \leq \| S_{\mathrm{B}}^{\mathfrak{r},h} S_{\mathrm{A}}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} - S_{\mathrm{B}}^{\mathfrak{r},h} I^{h} S_{\mathrm{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| + \| S_{\mathrm{B}}^{\mathfrak{r},h} I^{h} S_{\mathrm{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} - I^{h} S_{\mathrm{B}}(\tau) S_{\mathrm{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| \leq \sqrt{1 + C_{1}\tau} \| S_{\mathrm{A}}^{\frac{\tau}{2},h} \boldsymbol{\Phi}^{m} - I^{h} S_{\mathrm{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right) \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| + C_{3}\tau^{3} .$$
 (22)

再次使用引理1和引理3,可得

$$\|S_{\mathbf{A}}^{\frac{\tau}{2},h}\boldsymbol{\Phi}^{m}-I^{h}S_{\mathbf{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right)\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m}\| \leqslant \|S_{\mathbf{A}}^{\frac{\tau}{2},h}\boldsymbol{\Phi}^{m}-S_{\mathbf{A}}^{\frac{\tau}{2},h}I^{h}\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m}\|+\|S_{\mathbf{A}}^{\frac{\tau}{2},h}I^{h}\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m}-I^{h}S_{\mathbf{A}}\left(\frac{\tau}{2}\right)\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m}\| \leqslant \|\boldsymbol{\Phi}^{m}-I^{h}\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{m}\|+C_{2\tau}(\tau^{2}+h^{2}).$$

$$(23)$$

结合式(21)~(23),可得

$$\| \boldsymbol{\Phi}^{m+1} - I^{h} \hat{\boldsymbol{\theta}}^{m+1} \| \leqslant \sqrt{1 + C_{1} \tau} \| \boldsymbol{\Phi}^{m} - I^{h} \hat{\boldsymbol{\theta}}^{m} \| + (\sqrt{1 + C_{1} \tau} + 1) C_{2} \tau (\tau^{2} + h^{2}) + C_{3} \tau^{3} .$$
(24)

又
$$\| \boldsymbol{\Phi}^{\circ} - I^{h} \hat{\boldsymbol{\theta}}^{\circ} \| = 0$$
,因此,通过 Gronwall 不等式,可得

$$\| \boldsymbol{\Phi}^{m+1} - I^h \hat{\boldsymbol{\theta}}^{m+1} \| \leqslant C(\tau^2 + h^2) \,.$$

$$\tag{25}$$

合并式(19),(20),(25),有

$$\| \boldsymbol{\Phi}^{m+1} - I^h \boldsymbol{u}^{m+1} \| \leqslant C(\tau^2 + h^2).$$

即证。

3 数值实验

通过数值实验,证明该方法的准确性和数值效果,考虑 $\Omega = [-1,1]$,高斯核 $J_{\delta}(x)$ 形式为

$$J_{\delta}(x) = \frac{4}{\pi^{1/2} \delta^3} \mathrm{e}^{-\frac{|x|^2}{\delta^2}}, \qquad \delta > 0.$$

3.1 收敛性测试

为了检验所构造的数值格式(16)的准确性,选择初始条件

$$\begin{cases} u_0(x) = 2\cos(4\pi x), \\ v_0(x) = 0.1\cos(2.5\pi x). \end{cases}$$

考虑 $x \in [-1,1], \mu_u = 0.1, \mu_v = 0.1, F = 1$ 和 $\kappa = 1$ 的情况,分别计算数值解 u_i^M 的最大误差 E_{∞} 和 L_2 误差 E_2 ,定义为

和

其中: $\{u_i^M(\tau,h)|0 \leq i \leq N-1\}$ 表示 u(x,T)在时间步长 $\tau = T/M$ 和空间步长 h = 2/N 时的近似解。类 似地,可以定义 V-E_∞(h,τ)和 V-E₂(h,τ)。

考察空间收敛阶,固定时间剖分 $M=3000, T=1,\delta$ 分别取 0.5 和 1.0,计算结果,如表 1,2 所示。 表 1,2 中:Rate 为收敛阶。由表 1,2 可知:随着网格的加密,U 和 V 的最大误差 E_{∞} 和 L_2 误差 E_2 逐渐 减小,空间接近二阶精度,与理论分析一致。

表 1	空间收敛阶($T=1.M=3$	000.8 = 0.5
11 1	王时仅以的(1 1,11 0	000,0 0.0,

Tab. 1	Spatial	convergence	order	(T=1,	M=3	000,	δ=0.5)
--------	---------	-------------	-------	-------	-----	------	--------

_									
	N	$U ext{-}E_{\infty}$	Rate	U - E_2	Rate	V - E_{∞}	Rate	V - E_2	Rate
	10	3.545 9 $\times 10^{-3}$	—	2.767 5 $\times 10^{-3}$	—	3.342 0×10 ⁻⁴	—	$1.828 \ 3 \times 10^{-4}$	—
	20	8.982 6×10^{-4}	1.980 9	5.121 1×10^{-4}	2.434 1	7.376 3×10^{-5}	2.179 7	4.159 0×10 ⁻⁵	2.136 2
	40	2.161 9 $\times 10^{-4}$	2.054 8	$1.1985 imes 10^{-4}$	2.095 2	$1.819\ 4 \times 10^{-5}$	2.019 4	$1.027 \ 6 \times 10^{-5}$	2.017 0
	80	5.451 1×10^{-5}	1.987 7	2.949 0×10^{-5}	2.023 0	4.533 6×10^{-6}	2.004 7	2.561 3×10^{-6}	2.004 3
_									

表 2 空间收敛阶(T=1,M=3 000,δ=1.0)

Tab. 2	Spatial	convergence	order	(T=1,	M=3	000,	δ=1.0)
--------	---------	-------------	-------	-------	-----	------	--------

N	$U\!\!-\!E_{\infty}$	Rate	$U-E_2$	Rate	$V-E_{\infty}$	Rate	V - E_2	Rate
10	$1.095 8 \times 10^{-3}$	—	6.145 1×10^{-4}	—	5.971 7 \times 10 ⁻⁵	—	4.804 6×10^{-5}	—
20	2.185 4×10^{-4}	2.326 0	1.164 3 $\times 10^{-4}$	2.399 9	1.387 8 $\times 10^{-5}$	2.105 3	1.220 7 \times 10 ⁻⁵	1.976 7
40	5.590 5 $\times 10^{-5}$	1.966 8	2.750 2×10^{-5}	2.081 9	3.451 8 $\times 10^{-6}$	2.007 4	3.025 6×10^{-6}	2.012 4
80	1.383 5 $\times 10^{-5}$	2.014 7	6.782 6×10^{-6}	2.019 6	8.609 0 $\times 10^{-7}$	2.003 4	7.546 8 $\times 10^{-7}$	2.003 3

考虑时间收敛阶,固定空间剖分 $N=1000, T=1, \delta$ 分别取 0.5 和 1.0,计算结果,如表 3,4 所示。 由表 3,4 可知:随着时间剖分次数的增加,U 和 V 的最大误差和 L_2 误差逐渐减小,时间接近二阶精度, 与理论分析一致。

表 3 时间收敛阶(T=1,N=1 000,δ=0.5)

		Tab. 3	Temporal converg	gence order	(T=1, N=1 00)	$0, \delta = 0.5$)	
M	$U ext{-}E_{\infty}$	Rate	U - E_2	Rate	V - E_{∞}	Rate	V - E_2	Rate
10	6.425 7 $\times 10^{-4}$	_	5.107 6×10^{-4}	—	2.211 1×10^{-5}	—	1.990 7 $\times 10^{-5}$	_
20	$1.605\ 6 imes 10^{-4}$	2.000 7	$1.276\ 3 \times 10^{-4}$	2.000 6	5.533 2×10^{-6}	1.998 6	$4.974 8 \times 10^{-6}$	2.000 6
40	$4.013 \ 4 \times 10^{-5}$	2.000 2	3.190 5 \times 10 ⁻⁵	2.000 2	1.383 7 \times 10 ⁻⁶	1.999 6	$1.243 \ 6 \times 10^{-6}$	2.000 1
80	$1.003 \ 3 \times 10^{-5}$	2.000 1	7.976 1×10^{-6}	2.000 0	3.459 3 $\times 10^{-7}$	2.000 0	3.108 9 \times 10 ⁻⁷	2.000 0

表 4 时间收敛阶(T=1,N=1 000,δ=1.0)

Tab. 4	Temporal	convergence	order	(T=1,	N = 1	000,	$\delta = 1.$	0)
--------	----------	-------------	-------	-------	-------	------	---------------	----

_									
	M	$U\!\!-\!E_{\infty}$	Rate	U - E_2	Rate	V - E_{∞}	Rate	V - E_2	Rate
	10	4.272 9 $\times 10^{-4}$	_	3.836 2×10^{-4}	_	2.263 4×10^{-5}	—	1.856 6×10^{-5}	_
	20	$1.067 \ 9 \times 10^{-4}$	2.000 4	9.589 2×10^{-5}	2.000 2	5.657 8 $\times 10^{-6}$	2.000 2	4.638 2×10^{-6}	2.001 0
	40	2.669 6×10^{-5}	2.000 1	2.397 2 $\times 10^{-5}$	2.000 0	1.414 4×10^{-6}	2.000 1	1.159 4×10^{-6}	2.000 3
	80	6.673 9 $\times 10^{-6}$	2.000 0	5.993 0×10 ⁻⁶	2.000 0	3.536 0×10^{-7}	2.000 0	2.898 3×10^{-7}	2.000 1
-									

3.2 数值模拟

考察非局部算子对 GS 模型动力学的影响,选择初始条件为

$$\begin{cases} u_0(x) = 2\cos(4\pi x), \\ v_0(x) = 0.1\cos(2.5\pi x). \end{cases}$$

考虑 $x \in [-1,1], \mu_u = 0.1, \mu_v = 0.1, F = 1, \kappa = 1, N = 100, T = 5, M = 3000$ 时,不同 δ 对数值解的 影响,如图 1 所示。

由图 1 可知:GS 模型的动力学行为与δ大小有关,随着δ的增大,U和V达到稳态所需时间越长。





4 结束语

提出求解非局部 Gray-Scott 模型快速有效的算子分裂方法,并对其进行严格的理论分析,得到时 空均具有二阶精度的数值方法。数值结果表明,该方法具有良好的稳定性和有效性。

参考文献:

- GRAY P,SCOTT S K. Autocatalytic reactions in the CSTR: Oscillations and instabilities in the system A+2B→ 3B; B→C[J]. Chemical Engineering Science,1984,39:1087-1097. DOI:10.1016/0009-2509(84)87017-7.
- [2] TAKAISHI T, MIMURA M, NISHIURA Y. Pattern formation in coupled reaction-diffusion systems [J]. Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 1995, 12:385-424. DOI: 10.1007/BF03167236.
- [3] CALLAHAN T K, KNOBLOCH E. Pattern formation in three-dimensional reaction-diffusion systems[J]. Physica D:Nonlinear Phenomena, 1999, 132(3): 339-362. DOI: 10.1016/S0167-2789(99)00041-X.
- [4] HALE J K, PELETIER L A, TROY W C. Exact homoclinic and heteroclinic solutions of the Gray-Scott model for autocatalysis[J]. SIAM Journal on Applied Mathematics, 2000, 61(1):102-130. DOI:10.1137/s0036139998334913.
- [5] MURATOV C B, OSIPOV V V. Static spike autosolitons in the Gray-Scott model[J]. Journal of Physics A: Mathematical and General, 2000, 33(48): 8893-8916. DOI: 10.1088/0305-4470/33/48/321.
- [6] PENG Rui, WANG Mingxin. Positive steady-state solutions of the Noyes-Field model for Belousov-Zhabotinskii re-

action[J]. Nonlinear Analysis: Theory, Methods and Applications, 2004, 56(3): 451-464. DOI: 10.1016/j. na. 2003. 09.020.

- [7] LOU Yuan, MARTÍNEZ S, NI Weiming. On 3 * 3 Lotka-Volterra competition systems with cross-diffusion[J]. Discrete and Continuous Dynamical Systems, 1999, 6(1):175-190. DOI:10.3934/dcds. 2000. 6.175.
- [8] PANG P Y H, WANG Mingxin. Qualitative analysis of a ratio-dependent predator-prey system with diffusion[J]. Proceedings of the Royal Society of Edinburgh Section A: Mathematics, 2003, 133 (4): 919-942. DOI: 10. 1017/ s0308210500002742.
- [9] CHEN Wenyan, PENG Rui. Stationary patterns created by cross-diffusion for the competitor-competitor-mutualist model[J]. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 2004, 291(2): 550-564. DOI: 10.1016/j. jmaa. 2003. 11.015.
- [10] DU Qiang, JU Lili, LI Xiao, et al. Stabilized linear semi-implicit schemes for the nonlocal Cahn-Hilliard equation
 [J]. Journal of Computational Physics, 2018, 363: 39-54. DOI: 10.1016/j.jcp. 2018.02.023.
- [11] PEARSON J E. Complex patterns in a simple system[J]. Science, 1993, 261(5118): 189-192. DOI: 10. 1126/science. 261. 5118. 189.
- [12] MCGOUGH J S.RILEY K. Pattern formation in the Gray-Scott model[J]. Nonlinear Analysis: Real World Applications, 2004, 5(1):105-121. DOI:10.1016/s1468-1218(03)00020-8.
- [13] ZHANG Kai, WONG J C F, ZHANG Ran. Second-order implicit-explicit scheme for the Gray-Scott model[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2008, 213(2):559-581. DOI:10.1016/j. cam. 2007.01.038.
- [14] PENG Rui, WANG Mingxin. Some nonexistence results for nonconstant stationary solutions to the Gray-Scott model in a bounded domain[J]. Applied Mathematics Letters, 2009, 22(4):569-573. DOI:10.1016/j.aml.2008.06. 032.
- [15] CHEN Wan, WARD M J. The stability and dynamics of localized spot patterns in the two-dimensional Gray-Scott model[J]. SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, 2011, 10(2):582-666. DOI:10.1137/09077357X.
- [16] WANG Weiming, LIN Yezhi, YANG Feng, et al. Numerical study of pattern formation in an extended Gray-Scott model[J]. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2011, 16(4):2016-2026. DOI:10.1016/ j. cnsns. 2010. 09. 002.
- [17] LIU Yang, FAN Enyu, YIN Baoli, et al. TT-M finite element algorithm for a two-dimensionalspace fractional Gray-Scott model[J]. Computers and Mathematics with Applications, 2020, 80(7):1793-1809. DOI: 10. 1016/j. camwa. 2020. 08. 011.
- [18] ZHANG Hui, JIANG Xiaoyun, ZENG Fanhai, et al. A stabilized semi-implicit Fourier spectral method for nonlinear space-fractional reaction-diffusion equations [J]. Journal of Computational Physics, 2020, 405: 109141. DOI: 10. 1016/j. jcp. 2019. 109141.
- [19] ZHAI Shuying, WENG Zhifeng, ZHUANG Qingqu, et al. An effective operator splitting method based on spectral deferred correction for the fractional Gray-Scott model[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2023, 425:114959. DOI:10.1016/j. cam. 2022. 114959.
- [20] YAO Changhui, FAN Huijun, ZHAO Yanmin, et al. Fast algorithm for nonlocal Allen-Cahn equation with scalar auxiliary variable approach [J]. Applied Mathematics Letters, 2022, 126: 107805. DOI: 10. 1016/j. aml. 2021. 107805.
- [21] STRANG G. On the construction and comparison of difference schemes[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1968,5(3):506-517. DOI:10.1137/0705041.
- [22] RUBIN S G,GRAVES R A. A cubic spline approximation for problems in fluid mechanics[R]. Washington D C: [s. n.],1975.
- [23] MISHRA S, SVÄRD M. On stability of numerical schemes via frozen coefficients and the magnetic induction equations[J]. BIT Numerical Mathematics, 2010, 50:85-108. DOI:10.1007/s10543-010-0249-5.

(责任编辑:黄晓楠 英文审校:黄心中)

DOI:10.11830/ISSN.1000-5013.202308035

非线性 Schrödinger 方程的 龙格库塔配点格式



姚梦丽,滕宇航,赖艺颖,翁智峰

(华侨大学 数学科学学院, 福建 泉州 362021)

摘要: 采用4阶龙格库塔方法结合重心 Lagrange 插值配点法求解非线性 Schrödinger 方程。首先,在空间 方向上采用重心 Lagrange 插值配点格式进行离散,在时间方向上采用4阶龙格库塔方法离散,从而得到非线 性 Schrödinger 方程的龙格库塔配点格式。其次,对全离散格式进行相容性分析。结果表明:龙格库塔配点格 式具有高精度,且满足离散的质量和能量守恒。

关键词: 非线性 Schrödinger 方程; 4 阶龙格库塔方法; 重心 Lagrange 插值配点; 相容性分析 中图分类号: O 241.82 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2024)04-0534-09

Runge-Kutta Collocation Scheme for Nonlinear Schrödinger Equation

YAO Mengli, TENG Yuhang, LAI Yiying, WENG Zhifeng

(School of Mathematical Sciences, Huaqiao University, Quanzhou 362021, China)

Abstract: The fourth order Runge-Kutta method and barycentric Lagrange interpolation collocation method are used to solve the nonlinear Schrödinger equation. Firstly, the barycentric Lagrange interpolation collocation scheme is discreted in the spatial direction, and the fourth-order Runge-Kutta method is discreted in the temporal direction. The Runge-Kutta collocation scheme of the nonlinear Schrödinger equation is obtained. Secondly, the consistency analysis of the fully discrete scheme is analyzed. The results show that the Runge-Kutta collocation scheme has the high accuracy and satisfies the conservation of discrete mass and energy. Keywords: nonlinear Schrödinger equation; fourth-order Runge-Kutta method; barycentric Lagrange interpolation collocation; consistency analysis

在经典力学中,质点的状态采用质点的坐标和速度进行描述,质点的运动方程就是牛顿运动方程。 而在量子力学中,微观粒子的状态则采用波函数进行描述,且决定粒子状态变化的方程不再是牛顿运动 方程,而是 Schrödinger 方程^[1]。1926年,奥地利物理学家薛定谔提出了 Schrödinger 方程,该方程是量 子力学领域的基本方程,其在量子力学的重要性毫不逊色于牛顿运动定律在经典力学中的重要性.非线 性 Schrödinger(NLS)方程在量子力学、非线性光学、电磁学等离子理论和固体物理等领域中有着广泛 的应用。带初边值条件的 NLS 方程为

收稿日期: 2023-08-29

通信作者: 翁智峰(1985-),男,副教授,博士,主要从事偏微分方程数值解的研究。E-mail:zfwmath@163.com。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11701197);福建省自然科学基金面上资助项目(2022J01308);中央高校基本科研业务费专项基金资助项目(ZQN702)

式(1)中:i为虚数单位; ρ , β 为实常数; $\Omega \in \mathbb{R}^{d}$ (d=1,2)是有界区域; Δ 为 Laplace 算子,复值函数 u(x,t)为波函数;实值函数 v(x)为外场的势能; $u_0(x)$ 为足够光滑的函数。

带初边值条件的 NLS 方程的计算结果很好地反映量子力学效应和微观系统性质,且能很好地描述 微观粒子的状态随时间的变化情况。NLS 方程满足质量守恒,即

$$M(t) = \int_{\Omega} | u(\mathbf{x}, t) |^{2} d\mathbf{x} = M(0), \qquad (2)$$

以及满足能量守恒,即

$$E(t) = \int_{\Omega} (\rho \mid \nabla u(\mathbf{x}, t) \mid^{2} - v(\mathbf{x}) \mid u(\mathbf{x}, t) \mid^{2} - \frac{\beta}{2} \mid u(\mathbf{x}, t) \mid^{4}) d\mathbf{x} = E(0)_{\circ}$$
(3)

近年来,对 NLS 方程的数值研究引起了广大学者的关注。Hu 等^[2]研究了带 5 次项的 NLS 方程 4 阶紧致差分格式,并证明最大范数下的无条件稳定性和收敛性。Guo 等^[3]利用两级有限差分格式结合 吸收边界方法求 NLS 方程。Feng 等^[4]构造 NLS 方程的高阶守恒 SAV-Gauss 配置有限元格式。Wang 等^[5]提出 NLS 方程的两层网格有限元格式,并对其进行超收敛性分析。Fu 等^[6]研究二维 NLS 方程的显式高阶保指数差分龙格库塔格式。Hu 等^[7]提出带波动算子的二维 NLS 方程的守恒型差分 格式。Zhai 等^[8]利用算子分裂法求解空间分数阶 NLS 方程,并进行严格的误差分析和数值模拟。Deng 等^[9]提出 NLS 方程的二阶 SAV 格式,并给出严格的误差分析。

以上求解 NLS 方程的数值方法都是基于网格剖分,从而建立逼近格式。近年来,一种新型的无网格方法(重心插值配点法)引起学者关注。重心插值配点法具有计算格式简单、精度高、程序实施方便和节点适应性好等特点,使用 Chebyshev 节点的重心 Lagrange 插值公式还可以有效克服 Runge 现象。目前,重心插值配点法已经被推广到求解 Sine-Gordon 方程^[10]、Burgers 方程^[11-13]、粘弹性波方程^[14]、Allen-Cahn 方程^[15-18]、非线性对流扩散最优控制问题^[19-20]和分数阶电报方程^[21]等。基于前人的工作,本文主要采用 4 阶龙格库塔和重心 Lagrange 插值配点格式相结合的方法求解 NLS 方程,并给出该问题全离散格式的相容性分析。

1 预备知识

给定 m+1 个节点 x_j 和其函数值 $g_j(j=0,1,\dots,m)$,设插值多项式 p(x)是 g(x)的近似值,且满足 $p(x_j)=g_j$ 。将 p(x)改写成 Lagrange 插值多项式,即

$$g(x) \approx p(x) = \sum_{j=0}^{m} L_j(x) g_j \,. \tag{4}$$

式(4)中: $L_j(x)$ 为 Lagrange 插值基函数,且 $L_j(x) = \prod_{i=0, i\neq j}^m (x - x_i) / \prod_{i=0, i\neq j}^m (x_j - x_i)$ 。

为了保证良好的数值稳定性,重心 Lagrange 插值逼近未知函数时使用第2类 Chebyshev 节点,即

$$x_j = \cos\left(\frac{j}{m}\pi\right), \qquad j = 0, 1, \cdots, m_{\circ}$$
(5)

p(x)在节点 x_i 处的 v 阶导数可以表示为

$$p^{(v)}(x_i) = \frac{\mathrm{d}^v p(x_i)}{\mathrm{d}x^v} = \sum_{j=0}^m L_j^{(v)}(x_i) p_j = \sum_{j=0}^m D_{i,j}^{(v)} p_j, \qquad v = 1, 2, \cdots, m_{\circ}$$
(6)

由文献[22]可知,二阶微分矩阵 D⁽²⁾的计算公式为

$$D_{i,j}^{(2)} = L''_{j}(x_{i}) = -2 \frac{w_{j}/w_{i}}{t_{i}-t_{j}} \left\{ \sum_{k \neq i} \frac{w_{k}/w_{i}}{t_{i}-t_{k}} + \frac{1}{t_{i}-t_{j}} \right\}, \quad j \neq i,$$

$$D_{i,i}^{(2)} = -\sum_{j=0, j \neq i}^{m} D_{i,j}^{(2)} ,$$
(7)

2 NLS 方程的龙格库塔配点格式

对一维 NLS 方程的半离散格式进行推导,设 x_i ($i=0,1,\dots,m$)为 Chebyshev 空间节点,时间节点为 $t_k = k\tau, k = 0, 1, 2, \dots, n, \tau = \frac{T}{n}$ 。

在空间方向上采用重心 Lagrange 插值配点法得到半离散格式,即

$$iu_{t}(x_{i},t) = -\rho \Big(\sum_{k=0}^{m} L''_{i}(x) \Big) u(x_{i},t) - v(x_{i}) u(x_{i},t) - \beta \Big| u(x_{i},t) \Big|^{2} u(x_{i},t) \,. \tag{8}$$

式(8)的矩阵形式为

$$\mathbf{i}(\boldsymbol{u}_{\mathrm{h}}(t))_{t} = -\rho(\boldsymbol{D}^{(2)} \bigotimes \boldsymbol{I}_{m})\boldsymbol{u}_{\mathrm{h}}(t) - \boldsymbol{V}\boldsymbol{u}_{\mathrm{h}}(t) - \beta |\boldsymbol{u}_{\mathrm{h}}(t)|^{2} \boldsymbol{u}_{\mathrm{h}}(t) \,, \qquad (9)$$

式(9)中:符号⊗表示矩阵的 Kronecker 积; $\boldsymbol{u}_{h}(t) = [u_{0}(t), u_{1}(t), \cdots, u_{m}(t)]'; \boldsymbol{V} = \operatorname{diag}[v(x_{0}), v(x_{1}), \cdots, v(x_{m})]_{\circ}$

类似可得二维 NLS 方程的空间半离散格式,即

$$\mathbf{i}(\boldsymbol{u}_{h}(t))_{t} = -\rho((\boldsymbol{C}^{(2)} \otimes \boldsymbol{I}_{m})\boldsymbol{u}_{h}(t) + (\boldsymbol{I}_{n} \otimes \boldsymbol{D}^{(2)})\boldsymbol{u}_{h}(t)) - \boldsymbol{V}\boldsymbol{u}_{h}(t) - \beta |\boldsymbol{u}_{h}(t)|^{2} \boldsymbol{u}_{h}(t) \,. \tag{10}$$

定义算子 A 为

$$\boldsymbol{A} = \mathrm{i}[\rho(\boldsymbol{C}^{(2)} \otimes \boldsymbol{I}_{m}) + \rho(\boldsymbol{I}_{n} \otimes \boldsymbol{D}^{(2)}) + \boldsymbol{V} + \mathrm{diag}(\beta | \boldsymbol{u}_{\mathrm{h}}(t) |^{2})_{\circ}$$
(11)

式(10)可改写为

$$(\boldsymbol{u}_{\rm h}(t))_t = \boldsymbol{A} \boldsymbol{u}_{\rm h}(t)_{\circ} \tag{12}$$

其次,令u^k=u_h(t_k),在时间方向上用4阶龙格库塔方法进行离散,得到的全离散格式为

$$\boldsymbol{u}_{h}^{k+1} = \boldsymbol{u}_{h}^{k} + \frac{\tau}{6} (\boldsymbol{k}_{1} + 2\boldsymbol{k}_{2} + 2\boldsymbol{k}_{3} + \boldsymbol{k}_{4}) \,. \tag{13}$$

 $\mathfrak{K}(13) \oplus : \mathbf{k}_1 = \mathbf{A} \mathbf{u}_{h}^{k} : \mathbf{k}_2 = \mathbf{A} \left(\mathbf{u}_{h}^{k} + \frac{\mathbf{k}_1 \tau}{2} \right) : \mathbf{k}_3 = \mathbf{A} \left(u_{h}^{k} + \frac{\mathbf{k}_2 \tau}{2} \right) : \mathbf{k}_4 = \mathbf{A} \left(\mathbf{u}_{h}^{k} + \mathbf{k}_3 \tau \right) .$

3 相容性分析

设 p(x,y)是 u(x,y)的拉格朗日插值函数,满足 $p(x_i,y_j) = u(x_i,y_j), i = 0,1,\dots,m; j = 0,1,\dots,n$ 。 定义误差函数为

$$r(x,y) = u(x,y) - p(x,y)_{\circ}$$
(14)

引理 1^[21] 假设 $u \in C^{m+1}(a,b)$,则有

$$\begin{cases} \| r(x,y) \|_{\infty} \leqslant C_{1} \| u^{(m+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{x}}{2m} \right)^{m} + C_{2} \| u^{(n+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{y}}{2n} \right)^{n}, \\ \| r_{x,x}(x,y) \|_{\infty} \leqslant C_{1}^{**} \| u^{(m+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{x}}{2(m-2)} \right)^{m-2} + C_{2} \| u^{(n+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{y}}{2n} \right)^{n}, \\ \| r_{y,y}(x,y) \|_{\infty} \leqslant C_{1} \| u^{(m+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{x}}{2m} \right)^{m} + C_{2}^{**} \| u^{(n+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{y}}{2(n-2)} \right) (n-2). \end{cases}$$

式中: $l_x = \frac{b-a}{2}$; $l_y = \frac{d-c}{2}$;e 是自然常数。

基于引理1,可得定理1。

定理 1^[23] 若
$$u(x,y,t) \in C^{m+1}(\Omega) \times C^{2}(0,T], \Omega = \lfloor a,b \rfloor \times \lfloor c,d \rfloor, 则有$$

 $\| u(x,y,t) - u(x_{i},y_{j},t) \|_{\infty} \leqslant C_{1}^{**} \| u^{(m+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{x}}{2(m-2)} \right)^{m-2} + C_{2}^{**} \| u^{(n+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{y}}{2(n-2)} \right)^{n-2}.$
定理 2 地时间方向上其王 4 险龙格底塔方法的合商勒格式相容性分析

定理2为时间方向上基于4阶龙格库塔方法的全离散格式相容性分析。

定理 2 若 $u(x,y,t) \in C^{m+1}(\Omega) \times C^2(0,T], \Omega = [a,b] \times [c,d], 则有$

$$\| u(x,y,t) - u(x_{i},y_{j},t_{k+1}) \|_{\infty} \leq C \left(\tau^{5} + \| u^{(m+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{x}}{2(m-2)} \right)^{m-2} + \| u^{(n+1)} \|_{\infty} \left(\frac{el_{y}}{2(n-2)} \right)^{n-2} \right).$$

证明:设 $u(x_i, y_j, t)$ 是 u(x, y, t)空间方向基于重心插值配点法离散的数值解,则 i $u_t(x_i, y_j, t) = -\rho\Delta u(x_i, y_j, t) - v(x_i, y_j)u(x_i, y_j, t) - \beta |u(x_i, y_j, t)|^2 u(x_i, y_j, t) + \gamma_{i,j}$ 。 (15)

令 $T_{h}(x_{i}, y_{j}, t) = -\rho \Delta u(x_{i}, y_{j}, t) - v(x_{i}, y_{j})u(x_{i}, y_{j}, t) - \beta |u(x_{i}, y_{j}, t)|^{2}u(x_{i}, y_{j}, t),$ (16) 则式(15)可简化为

$$iu_t(x_i, y_j, t) = T_h u(x_i, y_j, t) + \gamma_{i,j} \,.$$
(17)

式(17)中: y_{i,j}是空间截断误差。

由定理1可知

$$\gamma_{i,j} \left\| \leqslant C_1^{**} \parallel u^{(m+1)} \parallel_{\infty} \left(\frac{\mathrm{e}l_x}{2(m-2)} \right)^{m-2} + C_2^{**} \parallel u^{(n+1)} \parallel_{\infty} \left(\frac{\mathrm{e}l_y}{2(n-2)} \right)^{n-2}.$$
(18)

设 $u_h^{k+1} = u(x_i, y_j, t_{k+1})$ 是u(x, y, t)时间方向基于4阶龙格库塔方法离散的数值解,则由泰勒展开公式有

$$u_{\rm h}^{k+1} = u_{\rm h}^{k} + \frac{\tau}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + \gamma_{i,j} + O(\tau^5) \,.$$
⁽¹⁹⁾

 $\vec{\mathfrak{X}}(19) \oplus :k_1 = T_{\rm h} u_{\rm h}^k; k_2 = T_{\rm h} \left(u_{\rm h}^k + \frac{k_1 \tau}{2} \right); k_3 = T_{\rm h} \left(u_{\rm h}^k + \frac{k_2 \tau}{2} \right); k_4 = T_{\rm h} \left(u_{\rm h}^k + k_3 \tau \right).$

证明完毕。

4 数值算例

12

定义 L^{∞} 误差(Err_{∞})和 L^2 误差(Err₂)分别为

7.173 8×10^{8}

$$egin{aligned} & \mathrm{Err}_{\infty} = \max_{1\leqslant i,j\leqslant M} ig| U_{i,j} - u_{i,j} ig|\,, \ & \mathrm{Err}_{2} = h \sqrt{\sum_{i,j=1}^{M} (U_{i,j} - u_{i,j})^{2}}\,. \end{aligned}$$

式中:u_{i,j}表示点 x_{i,j}处的精确解;U_{i,j}表示点 x_{i,j}处的数值解。

算例1 $\rho = \frac{1}{2}, \beta = -1, \exists (1)$ 的真解为 $u(x,t) = \exp(-\frac{3it}{2}) \cdot \sin x, \forall a, b = \sin x, b$ 界条件为 $u(0,t) = u(2\pi,t) = 0, \Rightarrow a \equiv b, v(x) = -\cos^2 x$ 。

选取区域 $\Omega = [0,2\pi] \times [0,1]$,时间步长 $\tau = 10^{-4}$ 。重心 Lagrange 插值配点格式和 2 阶有限差分格 式的 L^{∞} 误差和 L^2 误差,如表 1 所示。表 1 中: *M* 为节点数。由表 1 可知: 重心 Lagrange 插值配点格式 在空间上用较少的点就可以达到更高的精度。

表 1	L^{∞} 误差和 L^2 误差($\tau = 10^{-4}$)
Tab. 1	L^{∞} errors and L^2 errors ($\tau = 10^{-4}$)

		2 阶有限差分格式	
Err ₂	M	Err_{∞}	Err_2
838 7 \times 10 ²	16	6.392 6×10^{3}	1.550 4×10^{3}
599 5 $ imes$ 10 ³	32	$1.604 \ 3 \times 10^{3}$	2.792 8 $\times 10^4$
$651 8 \times 10^{5}$	64	4.014 7 \times 10 ⁴	$4.979~6 \times 10^{5}$
$459\ 2 \times 10^{6}$	128	$1.003 9 \times 10^{4}$	8.838 9 $\times 10^{6}$
	$\begin{tabular}{ c c c c c } \hline Err_2 & \\ \hline 838 & 7 \times 10^2 \\ \hline 599 & 5 \times 10^3 \\ \hline 651 & 8 \times 10^5 \\ \hline 459 & 2 \times 10^6 \end{tabular}$	$\begin{tabular}{ c c c c c c c } \hline Err_2 & M \\ \hline 838 & 7 \times 10^2 & 16 \\ \hline 599 & 5 \times 10^3 & 32 \\ \hline 651 & 8 \times 10^5 & 64 \\ \hline 459 & 2 \times 10^6 & 128 \\ \hline \end{tabular}$	2 阶有限差分格式 Err ₂ M Err _∞ 838 7×10 ² 16 6.392 6×10 ³ 599 5×10 ³ 32 1.604 3×10 ³ 651 8×10 ⁵ 64 4.014 7×10 ⁴ 459 2×10 ⁶ 128 1.003 9×10 ⁴

1.989 6×10^8

重心插值配点格式的误差及时间收敛阶,如表 2 所示。表 2 中:Rate1,Rate2 分别为 L[∞]误差收敛 阶,L² 误差收敛阶。由表 2 可知:龙格库塔配点格式的时间收敛阶是 4 阶。

256

2.509 9 \times 10⁵

1.565 6×10^{6}

表 2 重心插值配点格式的误差及时间收敛阶(M=16,算例 1)

Tab. 2 Errors and time convergence orders of barycentric Lagrange

interpolation collocation scheme (M=16, example 1)

τ	Err_{∞}	Rate1	Err_2	Rate2
1/60	4.881 2×10^{9}	_	1.183 9×10^{9}	_
1/72	2.347 2×10^9	4.015 8	5.692 8 $\times 10^{10}$	4.015 8
1/84	1.263 9×10^{9}	4.015 7	$3.065 \ 4 \times 10^{10}$	4.015 7
1/96	7.391 8×10^{10}	4.017 2	$1.792 \ 8 \times 10^{10}$	4.017 2

令 M=48,重心 Lagrange 插值配点格式的数值解、精确解(M=48),如图 1 所示。由图 1 可知:数





图 1 重心 Lagrange 插值配点格式的数值解、精确解(M=48)

Fig. 1 Numerical solution and exact solution of barycentric Lagrange interpolation collocation scheme (M=48)

不同数值格式的空间收敛阶,如图 2 所示。由图 2 可 知:有限差分格式的收敛阶是 2 阶,而重心 Lagrange 插值 配点格式的收敛阶满足指数收敛的性质,明显优于经典的 有限差分方法。

重心 Lagrange 插值配点格式对守恒量的保持情况 (*M*=48),如图3所示。图3中:*M*(*t*),*E*(*t*)分别为质量、能 量函数。由图3可知:龙格库塔配点格式满足质量守恒和 能量守恒,与理论相符。

算例 2 考虑一维 NLS 方程,选取 $M = 138, \tau = 1/40000$,对应的计算区间为 $[-2\pi, 10\pi] \times [0,5]$ 。 $\rho = 1$, $\beta = 2$,选取初始条件为 $u(x,0) = \operatorname{sech} x \exp(2ix)$,边界条件 为 u(a,t) = u(b,t) = 0,势函数 v(x) = 0。



图 2 不同数值格式的空间收敛阶 (M=48) Fig. 2 Spatial convergence orders of different numerical schemes (M=48)



Fig. 3 Maintain situation of barycentric Lagrange interpolation collocation scheme on conserved quantitie (M=48)

重心 Lagrange 插值配点格式的孤立波波形,如图 4 所示。

由图 4 可知:龙格库塔配点格式的孤立波波形随时间的改变而不断演化,并且在演化的过程中波形 并没有出现丝毫震荡,模拟结果充分体现出该格式的稳定性。



图 4 重心 Lagrange 插值配点格式的孤立波波形

Fig. 4 Initial isolated wave shape of barycentric Lagrange interpolation collocation scheme 算例3 考虑如下二维 NLS 方程,即

$$\begin{cases} iu_t + \frac{1}{2}\Delta u - v(x, y)u - |u|^2 u = 0, \\ u(x, y, 0) = \sin x \sin y, \\ u(0, y, t) = u(2\pi, y, t) = 0, \\ u(x, 0, t) = u(x, 2\pi, t) = 0. \end{cases}$$

势函数 $v(x,y)=1-\sin^2 x \sin^2 y$,真解 $u(x,y,t)=\exp(-2it) \cdot \sin x \sin y$ 。

选取区域 $\Omega \times [0,1], \Omega = [0,2\pi]^2, \tau = 10^{-3}$ 。重心插值配点格式和二阶有限差分格式的 L^{∞} 误差和 L^2 误差($\tau = 10^{-3}$),如表 3 所示。

由表 3 可知:重心 Lagrange 插值配点格式在空间上用较少的点就可达到更高的精度,计算精度明显优于经典的有限差分方法。

表 3 L [∞] 误差和 L ² 误差(τ=	$=10^{-3}$)	
---	--------------	--

Tab. 3 L	∞ errors	and L^2	errors	$(\tau = 10^{-1})$	-3)
----------	----------	-----------	--------	--------------------	-----

重心 Lagrange 插值配点格式				二阶有限差分格式	
M	Err_{∞}	Err_2	M	Err_{∞}	Err_2
6	8.402 4×10^3	8.402 4×10^{3}	10	2.936 7×10^{2}	3.246 7 $\times 10^{2}$
8	2.354 7 $\times 10^4$	2.705 9×10^4	20	8.197 6 $\times 10^3$	8.197 6 $\times 10^{3}$
10	1.905 9×10^{6}	2.058 5 \times 10 ⁶	40	2.054 5 $\times 10^3$	2.054 5 $\times 10^3$
12	4.589 3×10^8	4.589 3×10^8	60	9.135 2×10^4	9.135 2 \times 10 ⁴
16	3.839 8 $\times 10^{12}$	3.959 2×10^{12}	80	5.139 4×10^4	5.139 4×10^4

重心插值配点格式的误差及时间收敛阶(M=16),如表4所示。由表4可知:龙格库塔配点格式的时间收敛阶是4阶。

表 4 重心插值配点格式的误差及时间收敛阶(M=16,算例 3)

Tab. 4 Errors and time convergence orders of barycentric Lagrange

τ	Err_{∞}	Rate1	Err_2	Rate2
1/128	9.676 4×10^{10}	_	9.977 4×10^{10}	_
1/140	6.748 0×10^{10}	4.022 2	6.958 0×10^{10}	4.022 2
1/152	4.845 3×10^{10}	4.027 8	4.996 0×10^{10}	4.027 8
1/164	3.565 8×10^{10}	4.035 4	3.676 7×10^{10}	4.035 4

interpolation collocation scheme (M=16, example 3)

令 *M*=*N*=40,重心 Lagrange 插值配点格式的数值解、精确解(*M*=40),如图 5 所示。由图 5 可知:数值解图像和精确解图像基本吻合。



图 5 重心 Lagrange 插值配点格式的数值解、精确解(M=40)

Fig. 5 Numerical solution and exact solution of barycentric Lagrange interpolation collocation scheme (*M*=40) 不同数值格式的空间收敛阶,如图 6 所示。



图 6 不同数值格式的空间收敛阶(M=40)

Fig. 6 Spatial convergence orders for different numerical schemes (M=40)

重心 Lagrange 插值配点格式对守恒量的保持情况(M=40),如图 7 所示。





图 7 重心 Lagrange 插值配点格式对守恒量的保持情况(M=40)

Fig. 7 Maintain situation of barycentric Lagrange interpolation collocation schem on conserved quantities (M=40)

5 结束语

将龙格库塔与重心 Lagrange 插值 Chebyshev 配点法相结合,时间精度可达到 4 阶,空间精度满足 指数收敛,给出全离散格式的相容性分析,通过数值算例验证所提格式的高精度和有效性。通过与经典 的差分格式进行比较,表明提出的格式可以用较少的点达到较高的精度。该方法可推广到其他非线性 微分方程,从而为解决同类问题提供一种高精度数值求解方法。

参考文献:

- SCHRÖDINGER E. The present status of quantum mechanics[J]. Die Naturwissenschaften, 1935, 23:1-26. DOI:10. 48550/arXiv. 2104. 09945.
- [2] HU Hanqing, HU Hanzhang. Maximum norm error estimates of fourth-order compact difference scheme for the nonlinear Schrödinger equation involving a quintic term[J]. Journal of Inequalities and Applications, 2018, 2018(1): 1-15. DOI:10.1186/s13660-018-1775-y.
- [3] GUO Feng, DAI Weizhong. A new absorbing layer approach for solving the nonlinear Schrödinger equation[J]. Applied Numerical Mathematics, 2023, 189:88-106. DOI:10.1016/j. apnum. 2023.04.003.
- [4] FENG Xiaobing, LI Buyang, MA Shu. High-order mass-and energy-conserving SAV-Gauss collocation finite element methods for the nonlinear Schrödinger equation[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2021, 59:1566-1591. DOI: 10.1137/20M1344998.
- [5] WANG Junjun, LI Meng, GUO Lijuan. Superconvergence analysis for nonlinear Schrödinger equation with two-grid finite element method[J]. Applied Mathematics Letters, 2021, 122:107553. DOI:10.1016/j.aml. 2021.107553.
- [6] FU Yayun, XU Zhuangzhi. Explicit high-order conservative exponential time differencing Runge-Kutta schemes for the two-dimensional nonlinear Schrödinger equation[J]. Computers and Mathematics with Applications, 2022, 119: 141-148. DOI:10.1016/j. camwa. 2022. 05. 021.
- [7] HU Hanzhang, CHEN Yanping. A conservative difference scheme for two dimensional nonlinear Schrödinger equation with wave operator[J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 2016, 32(3): 862-876. DOI: 10. 1002/num. 22033.
- [8] ZHAI Shuying, WANG Dongling, WENG Zhifeng, et al. Error analysis and numerical simulations of strang splitting method for space fractional nonlinear Schrödinger equation[J]. Journal of Scientific Computing, 2019, 81:965-989. DOI:10.1007/s10915-019-01050-w.
- [9] DENG Beichuan, SHEN Jie, ZHUANG Qingqu. Second-order SAV schemes for the nonlinear Schrödinger equation and their error analysis[J]. Journal of Scientific Computing, 2021(69):88. DOI:10.1007/s10915-021-01576-y.
- [10] LI Jin, QU Jinzheng. Barycentric Lagrange interpolation collocation method for solving the Sine-Gordon equation
 [J]. Wave Motion, 2023, 120:103159. DOI: 10.1016/j. wavemoti. 2023, 103159.
- [11] HU Yudie, PENG Ao, CHEN Liquan, et al. Analysis of the barycentric interpolation collocation scheme for the Burgers equation[J]. Science Asia, 2021, 47:758-765. DOI:10.2306/ scienceasia1513-1874.2021.081.

- [12] 胡玉蝶,彭澳,陈丽权,等.有限差分-配点法求解二维 Burgers 方程[J]. 纯粹数学与应用数学,2023,39(1):100-112. DOI:10.3969/j. issn. 1008-5513.2023.01.008.
- [13] 罗诗栋,凌永辉. Rosenau-Burgers 方程的一种高精度有限差分格式[J]. 闽南师范大学学报(自然科学版),2022,35 (4):5-12. DOI:10.16007/j. cnki. issn2095-7122.2022.04.013.
- [14] ORUC Ö. Two meshless methods based on local radial basis function and barycentric rational interpolation for solving 2D viscoelastic wave equation[J]. Computational and Applied Mathematics, 2020, 79: 3272-3288. DOI: 10. 1016/j. camwa. 2020. 01. 025.
- [15] DENG Yangfang, WENG Zhifeng. Barycentric interpolation collocation method based on Crank-Nicolson scheme for the Allen-Cahn equation[J]. AIMS Mathematics, 2021, 6:3857-3873. DOI:10.3934/math. 2021229.
- [16] DENG Yangfang, WENG Zhifeng. Operator splitting scheme based on barycentric Lagrange interpolation collocation method for the Allen-Cahn equation[J]. Journal of Applied Mathematics and Computing, 2022, 68(5): 3347-3365. DOI:10.1007/s12190-021-01666-y.
- [17] 黄蓉,邓杨芳,翁智峰. SAV/重心插值配点法求解 Allen-Cahn 方程[J]. 应用数学和力学,2023,44(5):573-582. DOI:10.21656/1000-0887.430149.
- [18] 黄蓉,翁智峰.时间分数阶 Allen-Cahn 方程的重心插值配点法[J].华侨大学学报(自然科学版),2022,43(4):553-560.DOI:10.11830/ISSN.1000-5013.202101060.
- [19] HUANG Rong, WENG Zhifeng. A numerical method based on barycentric interpolation collocation for nonlinear convection-diffusion optimal control problems[J]. Networks and Heterogeneous Media, 2023, 18(2):562-580. DOI: 10.3934/nhm. 2023024.
- [20] 黄蓉,姚梦丽,翁智峰. 对流扩散方程最优控制问题的重心插值配点格式[J]. 华侨大学学报(自然科学版),2023, 44(3):407-416. DOI:10.11830/ISSN. 1000-5013. 202203023.
- [21] YI Shichao, YAO Linquan. A steady barycentric Lagrange interpolation method for the 2D higher-order time-fractional telegraph equation with nonlocal boundary condition with error analysis[J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 2019(35):1694-1716. DOI:10.1002/num. 22371.
- [22] BERRUT J P, TREFETHEN L N. Barycentric Lagrange interpolation[J]. SIAM Review, 2004, 46: 501-507. DOI: 10.1137/S0036144502417715.
- [23] SUN Haoran, HUANG Siyu, ZHOU Mingyang, et al. A numerical investigation of nonlinear Schrödinger equation using barycentric interpolation collocation method [J]. AIMS Mathematics, 2023, 8(1): 361-381. DOI: 10. 3934/ math. 2023017.

(责任编辑: 陈志贤 英文审校: 黄心中)

《华侨大学学报(自然科学版)》简介

BRIEF INTRODUCTION TO JOURNAL OF HUAQIAO UNIVERSITY (NATURAL SCIENCE)

《华侨大学学报(自然科学版)》(以下简称《学报》)创刊于1980年,是福建省教育厅主管,华侨大学 主办,面向国内外公开发行的自然科学综合性学术理论刊物。

《学报》的办刊宗旨是:坚持四项基本原则,贯彻"百花齐放,百家争鸣"和理论与实践相结合的方针, 广泛联系海外华侨和港、澳、台、特区的科技信息,及时反映国内尤其华侨大学等高等学府在理论研究、 应用研究和开发研究等方面的科技成果,为发展华侨高等教育和繁荣社会主义科技事业服务。

《学报》以创新性、前瞻性、学术性为办刊特色,主要刊登机械工程及自动化、测控技术与仪器、电气 工程、电子工程、计算机技术、应用化学、材料与环境工程、化工与生化工程、土木工程、建筑学、应用数学 等基础研究和应用研究方面的学术论文,科技成果的学术总结,新技术、新设计、新产品、新工艺、新材 料、新理论的论述,以及国内外科技动态的综合评论等内容。

《学报》既是中文综合性科学技术类核心期刊,又是国内外重要数据库和权威性文摘期刊固定收录的刊源。在历次全国及福建省的科技期刊评比中,《学报》都荣获过大奖。曾获得1995年"全国高等学校自然科学学报系统优秀学报一等奖",1997年"第二届全国优秀科技期刊奖",1999年,2008年"全国优秀自然科学学报及教育部优秀科技期刊",并于2001年入选"中国期刊方阵'双效期刊'"。

《学报》现为双月刊,A4开本。国内统一连续出版物号:CN 35-1079/N;国际标准连续出版物号: ISSN 1000-5013;国内邮发代号:34-41;国外发行代号:NTZ1050。

Journal of Huaqiao University (Natural Science) (abbreviated to the Journal), started publication in 1980, is a comprehensive and academic journal about natural science, open distribution at home and abroad, sponsored by Huaqiao University; The Education Department of Fujian Province is responsible for its work.

The Journal has its purpose; adhering to the four cardinal policies, carrying out the principles of the "Flowers Blossom; Schools of Thought Contend" and theory combined with practice, collecting information of science and technology from overseas and those in Hong Kong, Macao, Taiwan and special economic zones and all sides, and in time reflecting the scientific and technological achievements about domestic theoretical research, applied research and development research in our university and others, and serving for development of the overseas Chinese higher education and the socialist prosperity on science and technology.

The Journal, with characteristics of creative, perspective and academic study, publishes the articles of fundamental and applied research on mechanical engineering and automation, observing and controlling technology and instruments, electric and electronic engineering, computer, applied chemistry, materials and environmental engineering, chemical and biochemical engineering, civil engineering, architecture, applied mathematics, etc. and the academic reports on achievements of science and technology, theses on new technology, new design, new products, new crafts, new materials, new theories, and the comprehensive reviews on scientific and technological developments at home and abroad.

The Journal is not only a core Chinese periodical on comprehensive science and technology, but also an important data base at home and abroad and periodical source that the authoritative abstracts have been recorded regularly. The Journal won the prices among the national and provincial evaluation of scientific and technological periodicals such as "the first prize of good natural science of the national higher education periodicals" in 1995, "the good prize of the second national periodicals of science and technology" in 1997, "the good scientific and technological periodicals of the national natural science journals and the State Education Department" in 1999 and 2008, and selected into "'double-effect periodical' of the China periodicals matrix" in 2001. The Journal welcomes the contributors from our university and others.

The Journal is bimonthly publication, with format of A4. China standard serial number: CN 35-1079/N; International standard serial number: ISSN 1000-5013; Domestic mail number: 34-41; International issue number: NTZ1050.

《华侨大学学报(自然科学版)》编辑部

- •《中文核心期刊要目总览》
- ・RCCSE 中国核心学术期刊
- •中国期刊方阵"双效期刊"
- 中国科技论文在线优秀期刊
- · ISTIC 中国科技核心期刊

全国优秀科技期刊

华东地区优秀期刊

本刊被以下国内外检索期刊和数据库列为固定刊源

- ·俄罗斯《文摘杂志》(AJ, VINITI) •美国《化学文摘》(CAS) •波兰《哥白尼索引》(IC) ·荷兰《文摘与引文数据库》(Scopus) • "STN 国际" 数据库 ·德国《数学文摘》(Zbl MATH) • 中国学术期刊综合评价数据库 • 中国科学引文数据库 • 中国科技论文统计期刊源 • 中国期刊网 •中国学术期刊(光盘版) • 万方数据库 • 中国机械工程文摘 • 中文科技期刊数据库 • 中国化学化工文摘 • 中国力学文摘 • 中国无线电电子学文摘 • 中国生物学文摘 • 中国物理文摘
 - 中国数学文摘

华侨大学学报(自然科学版)

Huaqiao Daxue Xuebao (Ziran Kexue Ban) (双月刊,1980年创刊)

第 45 卷 第 4 期 (总	第 198 期)	2024 年 7 丿	月 20 日
-----------------	-----------------	------------	--------

主管单位:	福	建	省	教	育	厅
主办单位:	华	华 侨		大		学
	(中	国 福	自建 身	泉州 3	62021)
	(中	国福	夏建 「	夏门 3	61021)
编辑出版:	华侨	大学	学报自	然科学	版编辑	書歌
〔电	话	: 0595	5-2269	2545		
电子	信箱	: jour	nal@l	hqu. ed	u. cn	
M	址	: http	s://h	dxb. ho	1u. edu	. cn
主 编:	黄	伸 -				
印刷:	泉	州郎	免 报	印	刷 厂	
国内发行:	福廷	ま 省 。	泉州	市 邮	政 局	
订购处:	全国	国各土	地 邮	政 局	(所)	
国外发行 : 中国出版对外贸易总公司						
(北京 782 信箱,邮政编码 100011)						

ISSN 1000-5013 CN 35-1079/N 中国标准连续出版物号:

国内邮发代号: 34-41 国外发行代号: NTZ 1050 国内定价: <u>10.00 元/册</u> 60.00 元/套

JOURNAL OF HUAQIAO UNIVERSITY

(NATURAL SCIENCE)

(Bimonthly, Started in 1980)

Vol. 45 No. 4 (Sum 198) Jul. 20, 2024

Competent Authority: The Education Department of Fujian Province **Sponsor**: Huaqiao University (Quanzhou 362021, Fujian, China) (Xiamen 361021, Fujian, China) Editor in Chief : HUANG Zhongvi Edited and Published by Editorial Department of Journal of Huaqiao University (Natural Science) Tel: 0595-22692545 E-mail: journal@hqu.edu.cn https://hdxb. hqu. edu. cn **Distributed by** China Publication Foreign **Trading Corporation** (P. O. Box 782, Beijing, 100011, China)

