

絮凝体的 DLA 分形模拟及其分形维数的计算方法^{*}

金鹏康^{**} 王晓昌 郭 坤

(西安建筑科技大学, 西北水资源与环境生态教育部重点实验室, 西安, 710055)

摘 要 运用有限扩散凝聚 (DLA) 模型对絮凝体的成长过程进行了二维模拟。模拟絮凝体分别采用密度函数法、回转半径法、图像分析法进行分形维数计算, 分形维数均随模拟絮凝体尺寸的增大而减小。三种计算方法的结果显示, 密度函数法和回转半径法得到的分形维数基本相当, 但图像分析法所得到的分形维数较小, 约为密度函数法和回转半径法所得到的分形维数的 0.8 左右, 其原因可能是图像分析过程中计算机对图像的识别误差所致。以 DLA 模型模拟得到的絮凝体内部的孔隙率随絮凝体尺寸的增大而增加。絮凝体中孔隙率的增加是絮凝体密度减小、结构松散的主要原因, 也是絮凝体分形维数降低的主要因素。

关键词 絮凝体, 有限扩散凝聚模型, 分形维数。

一般情况下, 絮凝体的结构具有分形构造特征^[1, 2], 絮凝体的分形形态直接影响着水处理固液分离的效果, 如果絮凝体较为密实、形态结构紧凑, 则易于沉降。对水中粒子的絮凝过程进行模拟是目前探索絮凝体内部构造特征的重要途径之一, 其中通常被采用的模型是有限扩散凝聚 (DLA) 模型。另一方面, 描述絮凝体结构密实的方法是测定其分形维数, 分形维数愈大, 结构愈密实。分形维数的计算方法较多, 不同的分析方法间可能会有较大的出入, 但迄今为止的研究尚未有关于不同分形维数分析方法的比较。

本文对絮凝体的成长过程, 运用有限扩散凝聚模型进行了二维模拟, 对模拟絮凝体分别采用密度函数法、回转半径法、图像分析法进行了分形维数计算, 评价了絮凝体成长过程中结构的变化特征以及三种方法的分析特点。

1 DLA 模型

1981 年, Witten 和 Sander 提出了有限扩散凝聚模型^[3], 用来研究悬浮在溶液或大气中的金属粉末、煤灰和烟尘等微粒的无规则扩散凝聚过程。DLA 模型一般指在有限的空间内有一个中心粒子, 其它粒子在该有限空间内不断的自由运动, 这些粒子以随机行走的方式与中心粒子结合, 逐渐形成某一粒径的颗粒物, 由于微粒的运动受到有限空间的限制, 其运动方式会受到空间边壁的影响。

DLA 模型对絮凝体的生长过程模拟如下: 选取一个 $L \times L$ 的方形点阵, 在该二维平面中央设置一个固定的粒子, 也称之为“种子”。开始时, 在平面的边缘上随机产生一个粒子, 该粒子以布朗运动方式在平面上作无规则运动。假定粒子的运动有两种可能: 一种是与“种子”相碰并附着于“种子”上, 形成粒子簇; 再随机产生一个粒子, 继续作无规则运动。另一种是运动到平面的边缘上, 令其停止运动并消失, 或者根据周期性边界条件继续作无规则运动。将上述过程重复下去, 直至最后在中央形成一个树枝状的凝聚体, 其算法结构框图如图 1 所示。

2 分形维数的计算方法

(1) 密度相关函数法

密度相关函数法一般认为分形维数服从以下规律:

$$C(r) \sim r^{-a} \tag{1}$$

式中, $C(r)$ 为密度相关函数, 它与围绕一个给定点空间中的密度分布成正比。 a 是一个大于零小于欧氏维数 (对于二维为 2.0, 三维为 3.0) 的非整数, r 是两个粒子间的距离, 则分形维数 $D = d - a$

中国化学会“第八届水处理化学大会暨学术研讨会”论文 (2006 年 8 月 10 日)。

* 国家自然科学基金 (50278076, 20547001) 和陕西省教育专项基金 (05JK233) 资助项目。 ** 通讯联系人: pkjin@xauat.edu.cn

(d 为欧氏维数). $C(r)$ 和 r 可以通过图 1模拟过程中的数据给出.

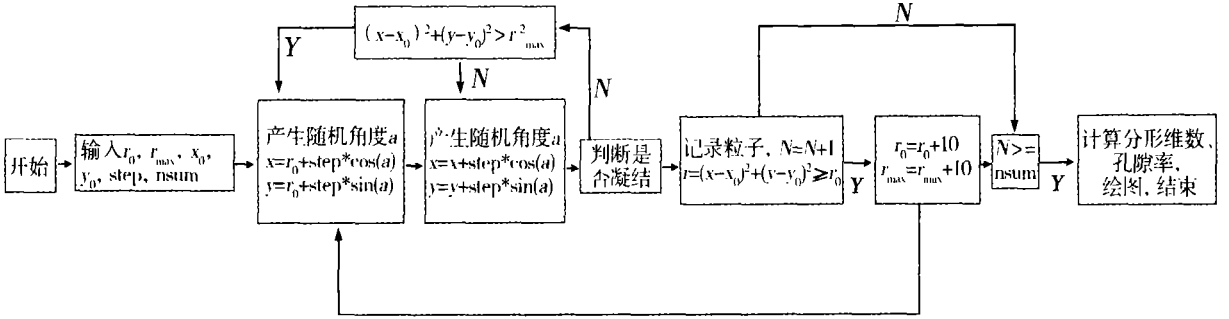


图 1 DLA 模拟算法结构框图
Fig. 1 Program structure of DLA simulation

(2) 回转半径法

回转半径法认为模拟絮凝体的分形维数服从以下规律:

$$N(r) \sim r^D \tag{2}$$

式中, r 为回转半径, $N(r)$ 为其内的粒子数, D 为分形维数.

回转半径指粒子在凝聚过程中得到的模拟絮凝体与粒子结合所能形成的最大半径, 显然, 随着模拟絮凝体尺寸的增大, 回转半径也不断增加, 相当于不断增长的同心圆半径 (如图 2 所示). 因此, 可以由 $N(r)$ 与 r 的双对数坐标曲线图的斜率求得分形维数 D 的值. 用上式求 D 时作了如下假定: 不考虑边界效应; 凝聚体不是一个几何上的多重分形.

对于 DLA 模型, 由于它具有明显的几何中心, 并呈对称结构, 比较容易应用回转半径法计算分形维数 D , 因此, 研究中常采用回转半径法计算分形维数.

(3) 图像法^[4]

通过显微摄影技术对絮凝体进行放大拍摄, 运用计算机图像处理软件分析拍摄的絮凝体图像, 可以测得絮凝体的投影面积 A 、周长 P 和在某一方向的最大长度 L (见图 3), 根据下述关系求得一维和二维分形维数:

$$P \sim L^{D_1} \tag{3}$$

$$A \sim P^{D_2} \text{ 或 } A \sim L^{D_2} \tag{4}$$

三维分形维数一般不能通过图像法直接得到, 需要进行一定的转换. 一种方法是根据投影面积求得等面积圆的直径 d_p (即当量直径), 再将其换算成球体体积 V , 根据下式推算 D_3 :

$$V \sim P^{D_3} \text{ 或 } V \sim L^{D_3} \tag{5}$$

但有研究认为, 这种方法计算的三维分形维数偏差较大, 建议以与投影面积同等大小的椭圆换算成椭球体体积再用式 (5)计算.

图像法是目前通过实验获得分形图像而普遍运用的分形维数计算方法.

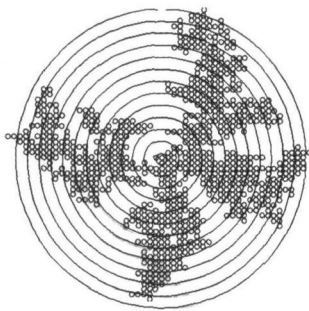


图 2 回转半径法分形维数计算示意图

Fig. 2 Illustration of calculation of fractal dimension by radius of gyration method

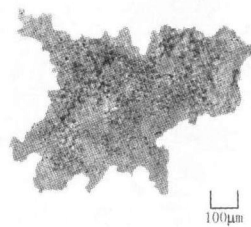


图 3 图像法分形维数计算示意图

Fig. 3 Illustration of calculation of fractal dimension by image analysis

3 模拟结果

由于 DLA 模型所生成的图形是个随机分形，每次所得到的分析参数各不相同，均带有一定的随机性，需要考虑它的统计特性。为此，对不同尺寸的絮凝体 (内部粒子数从 400 至 20000 变化) 进行模拟实验，每个尺寸的模拟絮凝体的模拟次数为六次，可以得到不同尺寸模拟絮凝体图像和两种模拟计算方法得到的分形维数。

3.1 不同粒子数的模拟结果

图 4 为不同尺寸模拟絮凝体二维图像的模拟结果，由图 4 可以看出，尽管模拟絮凝体尺寸不同，但所得的絮凝体图像基本是相似的。

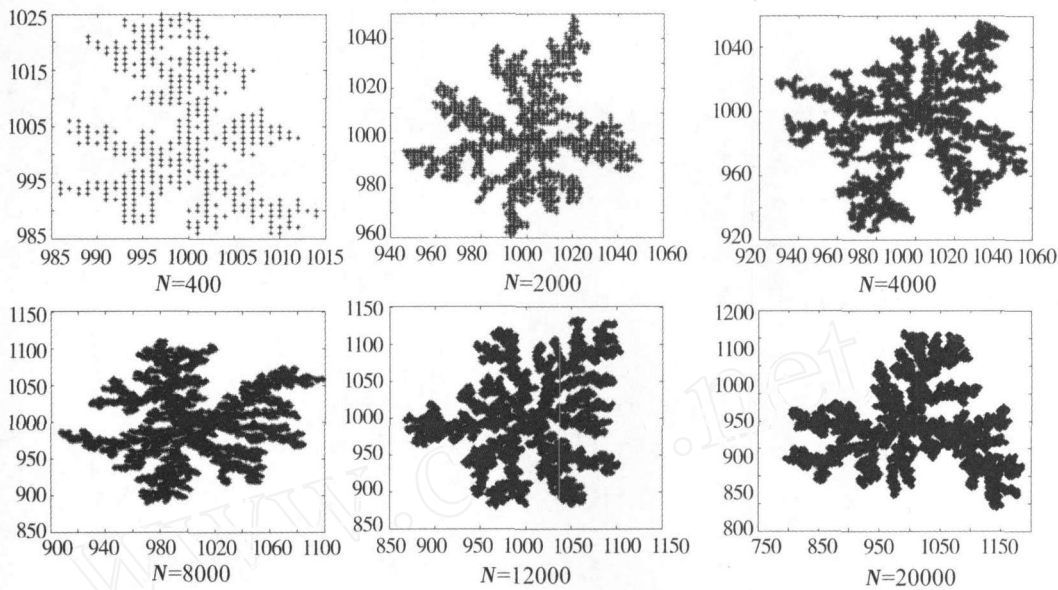


图 4 不同尺寸的 DLA 二维仿真模拟图像

Fig. 4 Two dimensional flocs with different size by DLA simulation

3.2 密度相关函数法计算的分形维数与粒子总数的关系

对模拟絮凝体内部的粒子数进行密度分布分析，按照公式 (1) 所示的关系可以得到图 5 所示的分形维数与模拟絮凝体尺寸的关系。由图 5 可以看出，随着模拟絮凝体尺寸的增大，分形维数逐渐降低。

3.3 回转半径法计算的分形维数与粒子总数的关系

取六次模拟结果的平均值作为某一尺寸下分形维数的统计值。由图 6 可以看出，即使是分形维数统计值也不是严格服从某一规律，具有随机性，但从整体可以看出，其统计特性是分形维数值随模拟絮凝体的尺寸的增大而减小。与密度函数法相比较，回转半径法的分形维数具有更大的随机分布特性，二者计算的分形维数略有出入，回转半径法的分形维数较密度相关函数法计算的分形维数低。

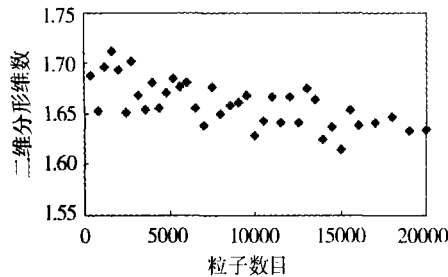


图 5 密度相关函数法计算的分形维数与其尺寸关系
Fig. 5 Relationship between fractal dimension of flocs calculated by density function and their size

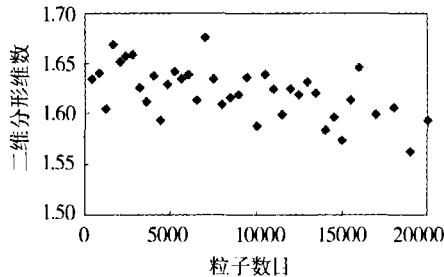


图 6 回转半径法计算的分形维数与其尺寸关系
Fig. 6 Relationship between fractal dimension of flocs calculated by radius of gyration and their size

3.4 图像法计算的分形维数与粒子总数的关系

每次模拟絮凝体可以得到 6 个图像, 对这 6 个模拟絮凝体通过图像分析软件分析模拟絮凝体的面积 (不含内部空洞) 及其最大长度, 按照公式 (4) 进行分析计算, 同样可得到图 7 所示的分形维数和模拟絮凝体尺寸之间的关系. 由图 7 可以看出, 图像法分析所得的二维分形维数随模拟絮凝体尺寸的增大而减小. 与图 5 和图 6 相比较, 图像法所得到的分形维数较小, 为密度函数法和回转半径法所得到的分形维数的 0.8 左右, 其原因可能是图像分析过程中计算机对图像的识别误差引起的.

由于回转半径法和密度相关函数法是计算机模拟过程中不断统计计算的结果, 这两种分析方法所得到的分形维数一般来说能够比较准确地反映分形维数. 本研究的实验结果表明, 图像法分析所得到的分形维数较小, 误差较大. 但是通常情况下, 对实验中的絮凝体进行拍照, 对其分形维数的解析采用的方法是图像解析法, 因此, 有必要对该方法进行修正. 图 7 所得到的结果对图像法分析分形维数具有一定的指导意义.

3.5 孔隙率与粒子总数的关系

由图 5 至图 7 所示的结果可以看出, 无论哪种分析方法, 以 DLA 算法模拟所得到的分形维数均随模拟絮凝体尺寸的增大而减小, 为了进一步分析絮凝体分形维数随时间变化的原因, 对模拟絮凝体内部的空隙率进行分析计算, 结果见图 8. 由图 8 可以看出, 孔隙率的变化具有随机特性, 但总体而言, 孔隙率随尺寸的增大而增加. 絮凝体中孔隙率的增加是絮凝体密度减小和结构松散的主要原因, 也是絮凝体分形维数降低的主要因素.

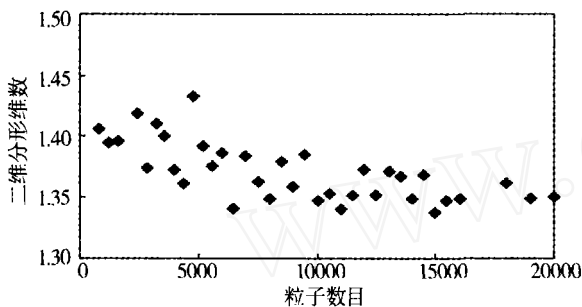


图 7 图像法计算的分形维数与絮凝体尺寸的关系

Fig. 7 Relationship between fractal dimension of flocs calculated by image analysis and their size

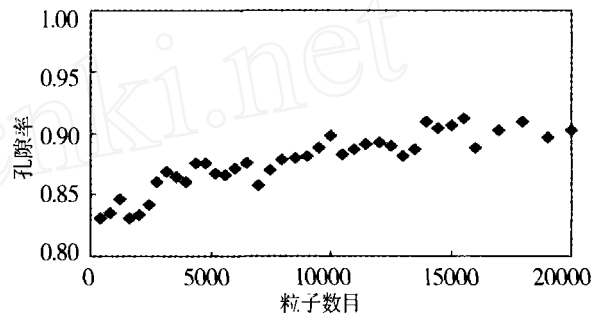


图 8 DLA 模拟絮凝体孔隙率与其尺寸的关系

Fig. 8 Relationship between porosity of flocs by DLA simulation and their size

4 结论

(1) DLA 模型在二维空间中所得到的分形图像, 无论采用哪种分析方法 (密度函数法、回转半径法、图像分析法), 得到的分形维数均随模拟絮凝体尺寸的增大而减小.

(2) 三种计算方法的结果显示, 密度函数法和回转半径法所得到的分形维数基本相当, 但图像分析法所得到的分形维数较小, 其原因可能是图像分析过程中计算机对图像的识别误差引起的. 以图像解析法分析所得的分形维数有必要进行修正.

(3) 以 DLA 模型所得到的模拟絮凝体内部的孔隙率随絮凝体尺寸的增大而增加. 絮凝体中孔隙率的增加是絮凝体密度减小和结构松散的主要原因, 也是絮凝体分形维数降低的主要因素.

参 考 文 献

- [1] Logan B E, Kilps J R, Fractal Dimensions of Aggregates Formed in Different Fluid Mechanical Environments. *Water Research*, 1995, 29 (2) 443—453
- [2] Bushell G, Amal R, Measurement of Fractal Aggregates of Polydisperse Particles Using Small-Angle Light Scattering. *J. Colloid and Interface Science*, 2000, 221 (2) 186—194
- [3] Witten T A, Sander L M, Diffusion-Limited Aggregation, A Kinetic Critical Phenomenon. *Physical Review Letters*, 1981, 47 (19) 1400—1403
- [4] 金鹏康, 王晓昌, 腐殖酸絮凝体的形态学特征和混凝化学条件. *环境科学学报*, 2001, 21 (增刊) 23—29

DLA SMULATION OF FRACTAL FLOCS AND
CALCULATION OF FRACTAL D MENSION

JIN Peng-kang WANG Xiao-chang GUO Kun

(Key Laboratory of Chinese Ministry of Education of Northwest Water Resource and Environmental Ecology,
Xi'an University of Architecture & Technology, Xi'an, 710055, China)

ABSTRACT

In this paper, two-dimensional DLA model was studied on the morphological structure of floc growth, and the fractal dimension of the simulated flocs was calculated and compared by three different methods: density function, radius of gyration of simulated flocs and image analysis respectively. The results showed that the fractal dimension calculated by the three methods were all decreased with the increasing of floc size. Comparing the results of the fractal dimension calculated by the three methods, it could find that the fractal dimension calculated by density function correspond with that by radius of gyration of simulated flocs. However, the fractal dimension calculated by image analysis is somewhat smaller than that calculated by the above two methods, which is about 0.8 of the fractal dimension calculated by the two methods. The difference in the fractal dimension is probably resulted from the identification of floc image by computer in the process of image analysis. Furthermore, the porosity of the simulated flocs increased with the increasing of floc size, which is the main reason of the decrease in the density and fractal dimension of the flocs.

Keywords: flocs, diffusion limited aggregation model, fractal dimension

《环境化学》致谢信

在 2005 年中，为保证《环境化学》的学术水平和稿件质量，各位专家付出了辛勤的劳动，在此，《环境化学》编辑部对专家的严谨治学态度和奉献精神表示衷心的感谢！

(按姓氏笔画顺序排列)

丁一刚	万国江	于水利	于红霞	马万红	马 放	孔繁翔	尹 华	尹澄清	文 晟	文湘华
王子健	王文华	王东升	王 伟	王连生	王建龙	王怡中	王 玮	王金达	王敬国	王 湛
王 超	王 鹏	王 慧	王毅力	王曙光	邓述波	代静玉	冯新斌	任丽萍	关乃佳	关晓辉
刘文新	刘国光	刘俊新	刘春艳	刘振宇	刘维屏	刘新会	刘 燕	吕晓龙	吕锡武	孙 成
孙红文	安俊岭	庄惠生	曲荣君	朱永官	朱利中	朱启忠	朱南文	朱 琳	牟玉静	许 平
闫 海	严小敏	严秀平	何孟常	何品晶	余立新	余 刚	余贵芬	吴光夏	吴 兑	吴 峰
宋秀贤	张 干	张兰英	张晓山	张晓健	张淑贞	张雁秋	张锡辉	张 慧	李义久	李玉武
李伟光	李光兴	李汝雄	李凭力	李和兴	李国学	李定邦	李明丰	李梦龙	李新军	李鑫钢
杨宏伟	杨柳燕	杨 敏	杨 曦	汪大翥	沈学优	沈英娃	沈 涛	羌 宁	肖羽堂	肖贤明
花日茂	辛金元	邹惠仙	陆文聪	陆晓华	陈永灿	陈同斌	陈宇炜	陈忠明	陈英旭	陈家军
陈 敏	陈景文	陈 靖	周东美	周立祥	周名江	周启星	周志强	周易勇	周培疆	孟紫强
季 民	罗运柏	范成新	郑丙辉	郑 正	郑有飞	郑西来	郑怀礼	郑明辉	金保升	金相灿
俞汉青	施汉昌	施惠生	胡乃非	胡良海	胡建英	胡勇有	胡 春	贺 泓	赵文宽	赵由才
赵进才	赵淑莉	钟 佐	骆永明	唐跃刚	夏星辉	徐又一	徐仁扣	徐向阳	栾兆坤	秦 炜
袁东星	郭伊苻	郭志刚	郭怀成	郭祥群	钱光人	高乃云	寇 元	崔宗均	康跃惠	黄应平
黄 标	黄骏雄	黄 霞	龚子同	彭党聪	程树培	童张法	童爱军	童裳伦	董树屏	董慧茹
谢正苗	虞云龙	雷乐成	蔡亚岐	蔡伟民	蔡伟明	蔡宝立	谭 欣	潘循哲	魏树和	魏源送