

分形理论在颗粒物研究中的应用

贾荷花, 李传统

(南京师范大学 动力工程学院, 南京 江苏 210042)

[摘要] 在介绍了分形理论发展过程的基础上, 给出了分形的定义、分形维数计算的多种理论模型, 并分析了不同模型之间的区别与联系. 总结了分形理论应用于土壤颗粒物、泥沙颗粒、大气颗粒物、地表灰尘、固体燃料燃烧或固体废物焚烧、岩石力学颗粒物领域所取得的主要研究成果和有待于进一步解决的问题, 指明了分形理论为研究固体颗粒物的物理与化学特性提供了新的方法与手段, 具有广阔的研究与应用前景.

[关键词] 分形理论, 分形模型, 分形维数, 颗粒物

[中图分类号] X513 [文献标识码] A [文章编号] 1672-1292(2010)02-0039-06

Applications of Fractal Theory in the Studies of Particulate Matters

Jia Hehua Li Chuantong

(School of Power Engineering, Nanjing Normal University, Nanjing 210042, China)

Abstract On the basis of introduction of the development process of fractal theory, this paper gives the definition of fractal, a variety of theoretical models of fractal dimension calculation and analysis of the differences and linkages among diverse models. It also summarizes the achieved major research results for the fractal theory is applied to the soil particles, sand particles, atmospheric particulates, road dust, solid fuel combustion or solid waste incineration and rock mechanics. The problems which need to be further resolved are raised. Fractal theory has a broad prospect of research and application, for it provides new methods for the study of solid particles of the physical and chemical characteristics.

Key words fractal theory, fractal model, fractal dimension, particulate matter

美国数学家 Mandelbrot 1967 年在《科学》杂志上发表的论文首次提出了分形的概念^[1, 2], 标志着分形概念的诞生. “分形”一词源于拉丁文 fractus, 本意为“不规则的、破碎的”. 直到 1982 年, Mandelbrot^[3]指出, Hausdorff 维数严格大于拓扑维数的集合称为分形, 这是对分形的最初定义. 许多学者认为, 此定义不够严格, 且无可操作性. Mandelbrot 又在 1986 年将分形定义表述为局部和整体以某种方式相似的集合^[4], 标志着分形理论的诞生. 同时还提出, 分形是非线性变换下的不变性, 但首先研究的是在线性变换下不变的自相似性.

到目前为止, 分形概念的提出仅 40 多年, 分形理论的创立仅有 20 多年, 但分形的概念和理论已广泛应用于自然科学、工程技术和社会科学中的许多领域, 成为国际上科学领域的前沿热点研究课题之一^[2]. 虽然国内外关于分形的定义还没有形成完整而精确的统一定义, 但分形概念的实质是明确的和公认的, 就是指被那些传统的物理学和几何学排除在外的不规则形体在一定范围内的自相似性. 分形理论主要致力于形态的描述, 目前已广泛应用于化学、生物学、材料科学、气象科学、地震科学、地理学、人文及社会科学等许多不同的领域. 把分形理论引入到颗粒物的研究中来, 以全新的数学方法和理论模型来描述颗粒的大小和形状分布, 有利于深入探究分形维数与土壤、泥沙、大气颗粒物、地表灰尘等颗粒物特性之间的相互关联规律, 有助于从新的方向和视角研究环境中颗粒物对人类和生态的影响, 为改善环境提供新的理论方法和依据.

收稿日期: 2009-10-20
通讯联系人: 李传统, 教授, 研究方向: 固体废物处理与管理、可再生能源. E-mail: lict2003@hotmail.com

1 颗粒物分形模型

颗粒物的分形模型是逐步建立起来的. 根据 Mandelbrot 分形理论, 判定颗粒物的粒度分布是否是分形的, 应满足下式:

$$n(> x) = C \cdot x^{-D}, \quad (1)$$

式 (1) 为颗粒数量 - 粒径分形模型, 其中, $n(> x)$ 为系统中粒度 $> x$ 的颗粒数目; D 为分形维数; C 为常数.

1982 年, Mandelbrot^[3] 首先建立了颗粒面积分形模型:

$$A(r > R) = C_a \left[1 - \left(\frac{R}{\lambda_a} \right)^{2-D} \right], \quad (2)$$

式中, $A(r > R)$ 是颗粒尺寸大于 R 的颗粒面积; C_a 、 λ_a 是描述颗粒形状和尺寸的常量; R 为颗粒尺寸; D 为分形维数.

1992 年, Tyler 等人^[5] 建立了三维空间的颗粒体积分形模型:

$$V(r > R) = C_v \left[1 - \left(\frac{R}{\lambda_v} \right)^{3-D} \right], \quad (3)$$

式中, $V(r > R)$ 是颗粒尺寸大于 R 的颗粒面积; C_v 、 λ_v 是描述颗粒形状和尺寸的常量; R 为颗粒尺寸; D 为分形维数.

随后, Tyler 等人^[5] 假设颗粒密度相同, 对 (3) 式进行变换得出:

$$\frac{M(r < R)}{M_T} = \left(\frac{R}{R_L} \right)^{3-D}, \quad (4)$$

式 (4) 为颗粒质量分形模型, 其中, $M(r < R)$ 是颗粒尺寸小于 R 的颗粒面积; M_T 是颗粒总质量; R 为颗粒尺寸; R_L 为最大颗粒尺寸.

2005 年, 王国梁等人^[6] 对“颗粒密度相同”的假设提出质疑, 对 (3) 式重新推导, 得出新的颗粒体积分形模型, 其步骤如下:

颗粒总体积表示为:

$$V_T = V(r > 0) = C_v \left[1 - \left(\frac{0}{\lambda_v} \right)^{3-D} \right] = C_v. \quad (5)$$

由式 (3)、(5) 可得:

$$\frac{V(r > R)}{V_T} = 1 - \left(\frac{R}{\lambda_v} \right)^{3-D}. \quad (6)$$

因为当 $R = R_L$ (R_L 为颗粒粒径分级中的最大值) 时, $V(r > R) = 0$, $V(r > R)/V_T = 0$, 因此 λ_v 在数值上等于最大的粒级值 R_L .

将 $r > R$ 的形式转化为 $r < R$, 式 (6) 就等同于下式:

$$\frac{V(r < R)}{V_T} = \left(\frac{R}{\lambda_v} \right)^{3-D}. \quad (7)$$

式 (7) 为颗粒的体积分形模型, 用体积代替了质量, 其形式与质量分形模型式 (4) 是完全相似的. 两者区别在于式 (4) 表示的质量分形模型是在假设的条件下得出来的, 式 (7) 表示的体积分形模型不需要假设不同粒径的颗粒物具有相同的密度, 该式在进行颗粒物的分维数计算中, 更具有合理性和可靠性.

2 颗粒物分形维数的计算及其数值范围

分形维数是描述颗粒物分形特征的定量参数. 分维数的大小不仅表明颗粒物的分形复杂程度, 而且为进一步研究颗粒物的相关物理与化学特性提供重要信息.

2.1 颗粒物分形维数的计算

对式 (4) 两边取对数, 得出:

$$\lg \frac{M(r < R)}{M_T} = (3 - D_M) \lg \frac{R}{R_L}, \quad (8)$$

式中, D_M 是质量分形维数.

同理, 对式 (7) 取对数可得:

$$\lg \frac{V(r < R)}{V_T} = (3 - D_V) \lg \frac{R}{R_L}, \quad (9)$$

式中, D_V 是体积分形维数.

计算颗粒物的分形维数 D (D_M 或 D_V), 首先需要对颗粒物进行粒径分级, 确定每一分级区间的算术平均粒径值, 然后根据分级区间划分出大于等于各区间算术平均粒径的累积质量或累积体积, 最后求取拟合曲线的斜率 $3 - D$, 确定其分形维数的数值 D .

2.2 不同颗粒物的分形维数范围

不同粒径分布颗粒物的分形维数是不同的, 若分形维数 $D = 0$ 表明系统中所有的颗粒物具有相同的粒径, 不存在粒径分布; $D > 0$ 则表明在一定的粒径范围内存在自相似的粒径分布^[7]. 不同颗粒的分形维数大多在 1 ~ 3 之间. 例如, 各种土壤样品颗粒分布的质量分形维数范围为 2.489 ~ 2.896^[8]; 泥沙颗粒的分形维数为 1.17 ~ 1.97^[7]; 南京市路面积尘的分形维数为 2.302 ~ 2.541^[9]; 北京市可吸入颗粒物的分形维数为 1.64 ~ 2.67^[10]; 芜湖市高新技术开发区地表灰尘的分形维数为 2.54 ~ 2.74^[11].

利用不同的公式计算的质量分形维数和体积分形维数大小不同, 但两者有密切的关系. 杨金玲等人^[12] 对土壤颗粒的体积分形维数值与质量分形维数值做过计算比较, 得出两者正相关的结论, 相应的拟合方程为 $D_V = 0.984 D_M - 0.0271$ 这说明不管是采用质量分形维数还是采用体积分形维数, 都能表征颗粒物的相关分形特性.

2.3 颗粒物的自相似性

自然界许多固体物质都是以颗粒群状态存在. 经验表明, 典型的颗粒过程通常产生几何自相似的颗粒体系, 颗粒体系总是以某种近乎连续的粒度分布而存在^[4]. 分形理论是一种非线性方法论, 判别一个对象是否是分形的, 自相似性、标度不变性、维数是分数, 都是分形对象的基本特征, 而自相似性是分形的本质特征. 研究表明, 颗粒粒径、颗粒表面积、颗粒体积等具有自相似性.

3 分形理论在颗粒物研究中的应用

自然界中颗粒物的种类多种多样, 本文以土壤、泥沙、大气颗粒物及地表灰尘等颗粒物为主要研究对象, 总结近年来分形理论在这些颗粒物领域内的应用, 尤其是粒径分布分形维数与颗粒物粒度分布、吸附能力以及沉积动力学行为等性质之间的相互关系, 可以促进与上述颗粒物物理、化学特性的相关研究.

3.1 分形理论在土壤颗粒物中的应用

自 80 年代分形理论应用于土壤学领域以来, 认为分形维数表征了土壤颗粒粒度的大小和数量, 分维数的数值能反映土壤粒径大小和分布的均匀程度^[13], 即分维数愈大, 粒度愈小, 细颗粒含量愈高; 分维数相对较小, 不同粒径分布的连续性较好, 质地就相对均匀.

张治伟等人^[14] 对石灰岩区的土壤做了实验研究, 发现土壤颗粒组成分维数与黏粒含量正相关, 与沙砾含量负相关, 即随黏粒含量增多, 分形维数增大; 沙砾含量增多, 分形维数减少, 这表明颗粒组成的分维数可以反映土壤的性质与岩溶生态环境的变化. 但是也有研究表明^[15], 土壤粒径分布分形性质与黏粒含量没有直接关系.

黄冠华等^[8] 分析了 10 种不同类型的土壤颗粒分布的分形维数, 发现其大小与土壤质地密切相关; 同时, 土壤颗粒粒径的大小对土壤颗粒间的结合、孔隙的大小、数量及几何形态都起着决定的作用. 李德成等^[16] 同样得出用土壤颗粒组成的分形维数描述土壤质地的可行性.

Tyler 和 Wheatcraft 用颗粒大小分布确定空隙分形维数, 有效估计了土壤水分特征曲线^[17]. 黄冠华等人^[8] 应用土壤颗粒的质量分形维数结合幂函数模型来估算土壤水分特性曲线, 解决了土壤水分特征曲线测定的困难.

3.2 分形理论在泥沙颗粒中的应用

分形理论应用于泥沙颗粒物的研究相对较少. 研究表明: 一方面, 泥沙粒径分布分维值与表面积分布存在关系, 随着粒径分布分维值的增大, 表面积累积百分率迅速增大; 另一方面, 分布分维值增大, 比表面积增大, 泥沙颗粒系统的吸附能力增大^[7], 这有助于研究泥沙颗粒吸附重金属污染物的能力.

3.3 分形理论在大气颗粒物中的应用

将分形理论应用于室内大气颗粒物的研究^[18], 结果表明: 室内大气颗粒物的分形维数值越大, 即颗粒表面越粗糙, 对有毒物质的吸附作用就越强; 同时, 对大气悬浮颗粒来说, 分形结构影响颗粒在空气中所受到的粘滞阻力, 轮廓分形维数越大, 所受的粘滞阻力越大, 越容易沉积. 谢云霞等人^[19]得出相同的结论: 大气颗粒物的分形形态影响它对有毒物质的吸附, 还影响它的沉积动力学行为. Chou 和 Lee^[20]通过实验得出动力学形状系数 K 与颗粒分维 D 之间的关系式为 $K = -0.53D + 2.62$ 由此可以得出结论: 室内大气颗粒表面的分维数值可以有效描述大气颗粒物表面的粗糙程度以及致毒性, 利用室内大气颗粒物的分形维数可进一步研究其流动、传质、化学反应的相关特性, 有助于揭示大气颗粒物的传质、传热与传质机理, 降低大气颗粒物对环境造成的污染.

3.4 分形理论在地表灰尘颗粒物中的应用

分形理论应用于地表灰尘颗粒物的研究刚刚起步, 文献^[9-10]计算了地表灰尘的分形维数; 文献^[11]进行了地表灰尘粒径分布的分维数与 pH 以及吸附性之间关系的实验研究, 研究表明: 地表积尘与其他颗粒物一样, 其分维数愈大, 地表灰尘的颗粒愈细, 饱和吸附量也愈大. 由于地表灰尘的来源复杂, pH 受到多种因素的影响, 地表灰尘粒径分布的分维数与 pH 之间的相关性并不明显, 该领域的研究有待于进一步深入进行.

3.5 分形理论在燃烧过程中的应用

在燃料特别是固体燃料的燃烧和固体废物的焚烧过程中, 会产生固体颗粒物, 如灰渣、除尘器飞灰等. 不同的颗粒直径和颗粒形状会影响到飞灰与灰渣的流动、传热与传质特性, 利用飞灰和灰渣的分形维数, 可以进一步了解飞灰和灰渣的物理与化学特性^[21], 有助于强化固体燃料和固体废物的燃烧过程, 也有助于提高不同型式除尘器的除尘效率和延长除尘器的使用寿命. 在固体燃料和固体废物的破碎过程中, 利用分形理论可以探寻提高燃料颗粒的分布均匀性的有效途径^[22], 在降低燃料准备能耗的同时, 提高燃料的燃烧效率, 降低燃烧过程的污染排放.

3.6 分形理论在岩石力学中的应用

我国将分形理论应用于岩石力学的研究在国际上起步较早, 谢和平院士领导的科研团队所取得多项研究成果处于国际领先水平. 我国已将分形理论用于煤炭和其他金属矿的地下开采、矿山支护、河流堤坝防护、海岸堤坝防护等许多工程领域, 且取得了显著的经济效益和社会效益.

4 结论

分形理论应用于土壤颗粒物、泥沙颗粒、大气颗粒物、地表灰尘颗粒、固体燃料的燃烧或固体废物的焚烧、岩石力学都取得了崭新的方法与途径, 也为今后的研究指明了方向, 可归结为:

(1) 分形维数可以表征颗粒物粒度大小、数量、分布均匀程度, 分维数越大, 粒度越小, 细颗粒含量越多, 质地分布越不均匀, 反之亦然; 分形维数还与颗粒的吸附能力相关, 颗粒的分布分维数越大, 对有毒物质的吸附能力就越强. 影响颗粒吸附能力的因素很多, 还有待进一步研究;

(2) 用颗粒的分形维数成功估计了土壤水分特征曲线, 但土壤颗粒分布的分形维数大小与土壤质地是否密切相关还有待更多的实验和理论证实;

(3) 地表灰尘颗粒物分形维数与其性质之间具有相关性, 它为地表灰尘的物理与化学特性的深入研究提供了新的方法;

(4) 分维数作为唯一研究颗粒物特性的量, 过于单一, 将分形理论的新的参数应用到颗粒物物理与化学特性的研究, 将是今后研究的方向之一;

(5)无论是应用质量分形模型还是体积分形模型计算粒径的分布分维数,都要先对粒径进行分级,而粒径分级标准直接影响分维数的变化,也即根据不同的粒径范围计算出来的分形维数会有所不同,如何消除不同模型带来的误差,有待进一步的研究。

[参考文献] (References)

- [1] Mandelbrot B B. How long is the coast of Britain: statistical self similarity and fractional dimension[J]. Science, 1967, 155: 636-638.
- [2] 秦耀辰, 刘凯. 分形理论在地理学中的应用研究进展[J]. 地理科学进展, 2003, 22(4): 426-436
Qin Yaochen, Liu Kai. Advancement of applied studies of fractal theory in geography[J]. Progress in Geography, 2003, 22(4): 426-436 (in Chinese)
- [3] Mandelbrot B B. The Fractal Geometry of Nature[M]. San Francisco: W H Freeman and Co, 1982.
- [4] 辛厚文. 分形及其应用[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1993.
Xin Houwen. Fractal and Application[M]. Hefei: China Science and Technology University Press, 1993 (in Chinese)
- [5] Tyler SW, Wheatcraft SW. Fractal scaling of soil particle size distributions: analysis and limitations[J]. Soil Sci Soc Am J, 1992, 56(2): 362-369.
- [6] 王国梁, 周生路, 赵其国. 土壤颗粒的体积分形维数及其在土地利用中的应用[J]. 土壤学报, 2005, 42(4): 545-550
Wang Guoliang, Zhou Shenglu, Zhao Qiguo. Volume fractal dimension of soil particles and its applications to land use[J]. Acta Pedologica Sinica, 2005, 42(4): 545-550 (in Chinese)
- [7] 李嘉, 周鲁, 李克锋. 泥沙粒径分布函数的分形特征与吸附性能[J]. 泥沙研究, 2003(6): 17-20
Li Jia, Zhou Lu, Li Kefeng. Fractal features of sediment granular distribution function and adsorption performance[J]. Journal of Sediment Research, 2003(6): 17-20 (in Chinese)
- [8] 黄冠华, 詹卫华. 土壤颗粒的分形特征及其应用[J]. 土壤学报, 2002, 39(4): 490-497
Huang Guanhua, Zhan Weihua. Fractal property of soil particle size distribution and its application[J]. Acta Pedologica Sinica, 2002, 39(4): 490-497 (in Chinese)
- [9] 李传统, 贾荷花. 南京市区路面积尘的物理与化学特性实验研究[J]. 南京师范大学学报: 工程技术版, 2009, 9(3): 28-32
Li Chuantong, Jia Huchua. Experimental investigation on physical and chemical characteristics of road dust in Nanjing[J]. Journal of Nanjing Normal University: Engineering and Technology Edition, 2009, 9(3): 28-32 (in Chinese)
- [10] 邵龙义, 沈蓉蓉, 杨书申, 等. 北京市 PM_{10} 粒度分布分形维数特征[J]. 中国矿业大学学报, 2008, 37(3): 407-411.
Shao Longyi, Shen Rongrong, Yang Shushen, et al. Fractal dimensions of size distribution of airborne inhalable particulates (PM_{10}) in Beijing[J]. Journal of China University of Mining and Technology, 2008, 37(3): 407-411 (in Chinese)
- [11] 张志明, 方凤满, 余键, 等. 城市地表灰尘颗粒体积分形特征及其吸附性[J]. 生态环境, 2008, 17(5): 1887-1890
Zhang Zhiming, Fang Fengman, Yu Jian, et al. Volume fractal characteristic and adsorbability in urban surface dust[J]. Ecology and Environment, 2008, 17(5): 1887-1890 (in Chinese)
- [12] 杨金玲, 李德成, 张甘霖, 等. 土壤颗粒粒径分布质量分形维数和体积分形维数的对比[J]. 土壤学报, 2008, 45(3): 413-419.
Yang Jinling, Li Decheng, Zhang Ganlin, et al. Comparison of mass and volume fractal dimensions of soil particle size distributions[J]. Acta Pedologica Sinica, 2008, 45(3): 413-419 (in Chinese)
- [13] 张季如, 朱瑞赓, 祝文化. 用粒径的数量分布表征的土壤分形特征[J]. 水利学报, 2004(4): 67-71
Zhang Jiru, Zhu Ruigeng, Zhu Wenhua. Fractal features of soil characterized by grain size distribution[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2004(4): 67-71 (in Chinese)
- [14] 张治伟, 傅瓦利, 朱章雄, 等. 石灰岩区土壤分形特征及其与土壤性质的关系[J]. 土壤, 2009, 41(1): 90-96
Zhang Zhiwei, Fu Wali, Zhu Zhangxiong, et al. Characteristics of fractal dimension of limestone soil and its correlation with soil properties[J]. Soils, 2009, 41(1): 90-96 (in Chinese)
- [15] 刘雪梅. 土壤粒径分布的多重分形描述[J]. 安徽农业科学, 2008, 36(24): 10557-10559.
Liu Xuemei. Multifractal description of soil particle size distribution[J]. Journal of Anhui Agri Sci, 2008, 36(24): 10557-10559 (in Chinese)

- [16] 李德成, 张桃林. 中国土壤颗粒组成的分形特征研究 [J]. 土壤与环境, 2000, 9(4): 263-265
Li Decheng, Zhang Taolin. Fractal features of particle size distribution of soils in China[J]. Soil and Environmental Sciences, 2000, 9(4): 263-265. (in Chinese)
- [17] 刘建立, 徐绍辉. 根据颗粒大小分布估计土壤水分特征曲线: 分形模型的应用 [J]. 土壤学报, 2003, 40(1): 46-52
Liu Jianli, Xu Shaohui. Figuring soil water characteristic curve based on particle size distribution data: application of fractal models[J]. Acta Pedologica Sinica, 2003, 40(1): 46-52 (in Chinese)
- [18] 胡小芳, 郭雷. 室内大气颗粒物分形结构分析 [J]. 广州化工, 2009, 37(1): 1-3
Hu Xiaofang, Guo Lei. Analysis of indoors atmospheric particles fractal structure[J]. Guangzhou Chemical, 2009, 37(1): 1-3 (in Chinese)
- [19] 谢云霞, 罗文峰, 李后强, 等. 大气颗粒物的分形特征 [J]. 世界科技研究与发展, 2004, 26(6): 24-28
Xie Yunxia, Luo Wenfeng, Li Houqiang, et al. Fractal characteristic of atmospheric particulate matters[J]. World Science Technology R&D, 2004, 26(6): 24-28 (in Chinese)
- [20] Charles C. K. Chou, Chung Te Lee. On the aerodynamic behavior of fractal agglomerates[J]. Aerosol Sci, 1997, 28: 513-514
- [21] 缪缓钰, 蒋友新, 常捷. 分形在煤粉燃烧中的进展 [J]. 煤炭学报, 2007, 32(9): 967-970
Miao Huanyu, Jiang Youxin, Chang Jie. Research progress of fractal for coal combustion[J]. Journal of China Coal Society, 2007, 32(9): 967-970 (in Chinese)
- [22] 焦红蕾, 夏德宏, 张省现, 等. 基于分形方法的煤炭研磨颗粒粒度分布模型 [J]. 北京科技大学学报, 2007, 29(11): 1151-1153
Jiao Honglei, Xia Dehong, Zhang Shengxian, et al. Fractal model for particle size distribution of coal grinding[J]. Journal of University of Science and Technology Beijing, 2007, 29(11): 1151-1153 (in Chinese)

[责任编辑: 刘 健]