

矿物分形生长的动力学模型与数值模拟

谢焱石,谭凯旋,王正庆,胡凯光

(南华大学 核资源与核燃料工程学院,湖南 衡阳 421001)

摘要:本文通过考虑离子电位、环境温度以及噪声等的影响,建立了一个矿物分形生长的 DLA 模型.在 300×300 的正方格子中心处放置一个种子构成生长中心,吸引域设置为菱形,主要考虑了三个参数的影响,其中总体的表面粘附几率为 P_g ,范围为 $0 \sim 99\%$,用来消除噪声的影响,模拟矿物的结晶生长速度与矿物结构的关系;吸附距离 d 变化范围为 $0 \sim 9$ 单元距离,用来模拟离子电位对矿物生长的影响;填充间隔 s 的变化范围为 $0.00 \sim 5.00$ 单元距离,表现为环境温度对矿物生长体系的影响.进行了三组模拟,分别是固定其中 2 个参数,改变另一个参数.结果表明,DLA 集团的分维值随模拟参数成规律性的变化,分形维数在一定的条件下随着 P_g 的降低、 d 和 s 的增大而增大,矿物的结构也随之从浸染状、星散状或放射状逐渐过渡到团块状.该模型只是对三维分形生长的二维平面模拟,不能完全反映整个矿物在三维受限空间中聚集生长的复杂动力学.

关键词:DLA 模型;矿物;分形生长

中图分类号:P611.5 **文献标识码:**A

An Numerical Approach for the Dynamic Model of Fractal Growth of Minerals

XIE Yan-shi, TAN Kai-xuan, WANG Zheng-qing, HU Kai-guang

(School of Nuclear Resources and Nuclear Fuel Engineering, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China)

Abstract: A modified fractal growth model of minerals is proposed to simulate the influence of ionic potential, temperature and noises. One seed is placed at the center of a square with 300×300 lattices as a growth focus and the attraction domain is set to diamond. Three main parameters are considered in this model. One of them is the probability of surface adhesion(P_g) which with the range of 0 to 99% to eliminate the impact of noise. The others

收稿日期:2010-12-20

基金项目:湖南省教育厅优秀青年基金资助项目(08B068)

作者简介:谢焱石(1976-),男,湖南隆回人,南华大学核资源与核燃料工程学院副教授.主要研究方向:非线性成矿作用动力学.

are adsorption distance d and filled interval s . The former parameter varies from 0 to 9 units which on behalf of the ionic potential of particles and the latter varied from 0.00 to 5.00 units distance to perform the influence of environmental temperature on minerals growth system. Three model sets are carried out with two fixed parameters and the other variable parameter. The results show that the fractal dimension of DLA groups are increasing with the decrease of P_g and the increases of d and s , as well as the structure of minerals from disseminated, star or radial gradual transition to agglomerate. The model is a two-dimensional simulation for three-dimensional fractal growth and can not fully reflect the complex growth dynamics of mineral aggregate in space.

key words: DLA model; minerals; fractal growth

0 前言

分形生长意指一个具有扩展对称性的对象(聚集集团)随时间增大^[1].自然界中的分形生长现象比比皆是,然而由于自然界中生长过程非常复杂,目前难以通过建立动力学方程来研究,通过计算机数值模拟生长过程已经成为目前研究分形生长的一种重要手段.这些分形生长系统都可以通过 DLA(Diffusion limited Aggregation)扩散限制凝聚生长模型来进行数值模拟. DLA 模型最早由 Witten 和 Sander 在 1981 年提出^[2],由于它和许多非平衡现象诸如电击穿、电沉积、薄膜生长、流体驱替等现象密切相联系^[1],这个模型很快被科学家们所接受并用来解释各种与分形形态有关的生长和凝聚现象^[3-5].传统 DLA 模型的规则简单:首先置一初始粒子做为种子,然后在远离种子任一位置随机产生一个粒子使其无规行走直至运动到种子的近邻停止,并成为集团的一部分;然后再随机产生一个粒子并无规运动到集团的近邻,附着其上也成为集团的一部分;重复该过程就可以得到足够大的 DLA 集团,传统的 DLA 模型生长的分形凝聚体满足标度不变性和自相似性,具有均匀的统计自相似性分形结构,其分数维与模型无关^[2-3],在二维空间中 $D = 1.67$,在三维空间中 $D = 2.50$ ^[6].近年来的研究发现,其分维值和具体模型有关^[5],并通过增加或更改一些参数,建立了诸多不同的 DLA 模型^[4,7-8].这些改善和修正,丰富了人们对 DLA 集团的认识,但是这些模型都没有很好地与实际的矿物生长结合起来,没有考虑模拟参数与物理化学参数的联系,给深入了解矿物的分形生长带来障碍.矿物(晶体)生长系统大致可分为熔体生长,水溶液生长和气相生长,无论是哪一种生长方式,其生长过程都可以通过 DLA 模型来进行研究.本文通过对现有 DLA 模型加以

改进,通过不同的参数设置来对应不同的物理化学过程或环境,建立一个新的 DLA 模型用于模拟自然界中矿物的生长动力学过程,为进一步研究和了解自然界矿物分形生长的动力学机理奠定基础.

1 矿物分形生长 DLA 模型

结合矿物生长的主要物理化学参数与环境变量,本文建立的 DLA 生长模型如下:在 300×300 的正方格子中心处放置一个种子,称生长中心.模型可以设置多个种子作为生长中心,本次研究主要考虑一个生长中心的情况.而后将另一个颗粒在随机处加入并作运动,运动方式分为随机路径和直线路径.颗粒作随机运动时,每次运动一步,每一步运动距离为一个单位距离,直至它与种子颗粒相接触并以概率 P 粘附在一起,成为成长中的 DLA 集团,或者逃离出边界之外.接着同样在随机位置处加入第三个颗粒并作随机运动,直到与成长中的 DLA 集团相接触并以相同概率 P 粘接在一起,此过程不断重复,当达到所要求的 DLA 集团大小(总粒子数 N)时结束.作直线运动时,随机选择一个方向让颗粒直线行走,若与种子颗粒碰撞,则以概率 P 粘接在一起,成长为 DLA 集团,若没有发生碰撞则放弃这个颗粒,接着放入另一个颗粒重复上述过程,直至达到设定的 DLA 集团大小时结束.模拟中一般采用随机路径,如果模拟的目标 DLA 集团较大时,为了节省模拟时间,才考虑采用直线路径.考虑到矿物各向异性的影响,吸引域可设置为菱形、正方形、三角形或正六边形等,从而可以模拟不同晶系的矿物生长,吸引域的设置通过不同方向采用不同的表面粘附几率 P_g 来实现,本次吸引域设置为菱形.总体的表面粘附几率为 P_g ,范围为 $0 \sim 99\%$,主要可以模拟

矿物的结晶生长速度, P_g 越大, 游离粒子越容易被晶核所俘获, 晶体生长越快. 另外两个参数分别为吸附距离 d 和填充间隔 s . 其中 d 变化范围为 0 ~ 9 个单位距离, 用来模拟离子电位对矿物生长的影响. 离子电位表示离子吸引或排斥对方电荷的能力, 是衡量离子电场强度的一个参数, 与离子本身的电价成正比, 与离子半径成反比. 吸附距离 d 越大, 表明离子电场强度越强, 粒子越容易被吸引到聚集体上. s 的变化范围为 0.00 ~ 5.00 单位距离, 代表粒子间隔多少单位距离就算粘附在一起, 表现为粒子的自由活动能力, 数字越小, 粒子自由活动能力越好, 反之, 自由活动能力越差. 可以模拟环境温度对矿物生长的影响. 环境温度可以影响物质的扩散系数^[9], 温度升高可以使溶液中离子扩散到晶体生长位点的速率变大; 同时升高温度可以降低晶体的成核速率, 其主要原因是增加了晶体成核的临界半径, 提高了晶体成核的活化能^[10].

2 模拟结果与讨论

2.1 总体表面粘附几率 P_g 的影响

矿物结晶生长过程中, 由于颗粒间的凝聚受到排斥, 颗粒每次的碰撞并不能保证颗粒能粘附在一起, 模型中通过考虑总体表面粘附几率 P_g 对矿物微粒的沉淀概率进行模拟. 图 1 为部分模拟得到的 DLA 集团, 所含颗粒总数 N 均为 3 000 个, 其它参数的设置见表 1. 并对模拟所得到的 DLA 集团采用以模拟中心为圆心, 对半径 r 及对应圆内的粒子总数 $N(r)$ 做双对数图(图 1), 求出该 DLA 集团的分维值 D_f (表 1). 随着总体吸附表面几率的升高, 模拟中所得到的 DLA 集团逐渐开放(图 1), 其分维值 D_f 逐渐变小(表 1). 在相同数量颗粒的情况下, P_g 越高, 其回转半径就越大, 那么所得 DLA 集团就越开放, 矿物生长结果多表现为浸染状、星散状或放射状等, 其原因在于 P_g 较大时, 矿物结晶速度较快, 颗粒较容易被 DLA 集团外部分枝所截获, 很难进入 DLA 集团内部.

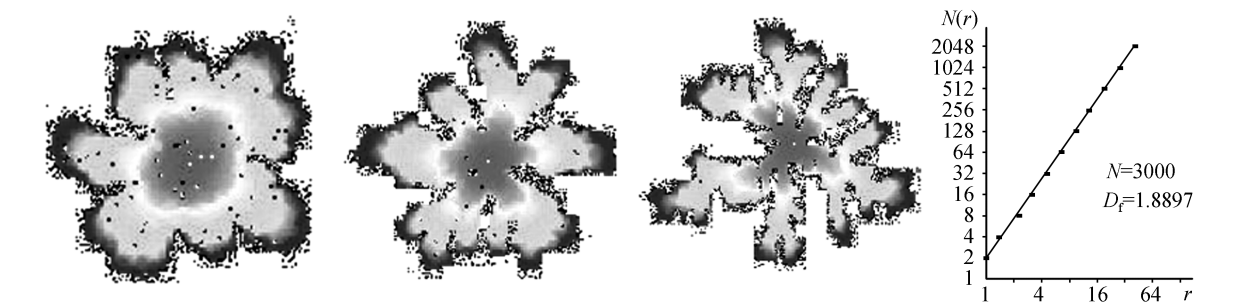


图 1 P_g 为 10、50、90 的分形生长模拟及 P_g 为 50 的 $\text{Lnr-Ln}N(r)$ 曲线
Fig. 1 Fractal growth simulation for P_g is 10, 50, 90 and the $\text{Lnr-Ln}N(r)$ curve for P_g equal 50

表 1 不同参数对 DLA 集团分形维数的影响
Table 1 The impact of different parameters on the fractal dimension of DLA Group

参数	模拟序号															
	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	B1	B2	B3	B4	B5	C1	C2	C3	C4
N	3 000	3 000	3 000	3 000	3 000	3 000	3 000	2 500	2 500	2 500	2 500	2 500	2 000	2 000	2 000	2 000
$P_g/\%$	5	10	30	50	70	90	99	50	50	50	50	50	50	50	50	50
d	5	5	5	5	5	5	5	0	1	3	5	7	5	5	5	5
s	3.00	3.00	3.00	3.00	3.00	3.00	3.00	3.00	3.00	3.00	3.00	3.00	0.10	1.00	2.00	3.00
D_f	1.968 6	1.999 4	1.903 4	1.889 7	1.881 0	1.803 1	1.829 0	1.741 5	1.704 8	1.884 6	1.918 0	1.929 3	1.738 6	1.833 3	1.965 6	1.926 4

2.2 吸附距离 d 的影响

不同的矿物生长体系中存在不同的离子的电价, 离子半径等, 这些因素的存在使得各颗粒间有

着不同的相互作用, 吸附距离 d 可以用来模拟这些因素在矿物生长体系中的作用, d 越大, 表示粒子越容易被吸引到聚集体上. 其它参数的设置见表 1,

同时求得对应 DLA 集团的分维值 D_f 。图 2 为在其他因素不变的情况下部分 DLA 集团的形态随 d 的变化。模拟结果表明,随着吸附距离 d 的增大,模拟中所得到的 DLA 集团逐渐密实(图 2),其分维值 D_f 逐渐增大(表 1), d 较小时,DLA 集团较为开放,分枝化明显,矿物形态以浸染状、星散状或放射状为主;随着吸附距离 d 的增大,DLA 集团渐趋密实,

分枝化现象也逐渐消失,矿物形态表现为团块状等。吸附距离 d 反应了 DLA 集团与颗粒之间的作用力的大小,在 d 较小时,颗粒之间的作用力较弱,只有较近的粒子才易被吸附,导致 DLA 集团形态开放及分枝严重; d 较大时,颗粒之间的作用力就大大加强了,较远距离的粒子都能够被吸附过来,形成了较为密实的 DLA 集团。

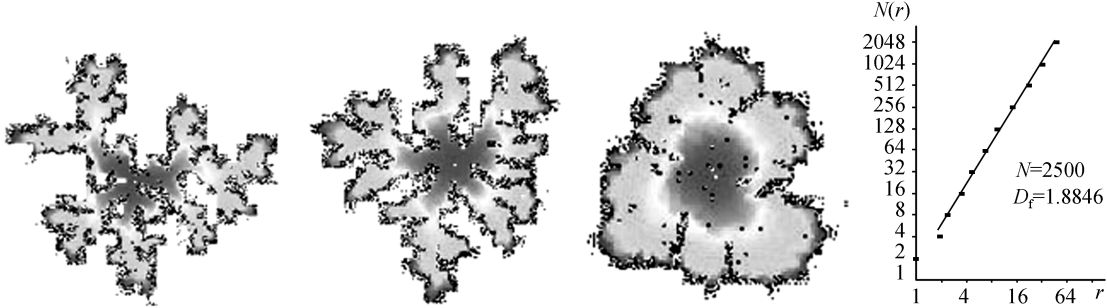


图 2 d 为 0、3、7 的分形生长模拟及 d 为 3 时的 $\text{Lnr-LnN}(r)$ 曲线
Fig. 2 Fractal growth simulation for d is 0,3,7 and the $\text{Lnr-LnN}(r)$ curve for d equal 3

2.3 填充间隔 s 的影响

填充间隔 s 的变化范围为 0.00 ~ 5.00 单位距离,代表粒子间隔多少就算粘附在一起。其它参数及对应 DLA 集团的分维值 D_f 见表 1。图 3 所示部分 s 值对应的 DLA 集团形态的变化,模拟结果与吸附距离 d 类似,其形态随着 s 的增大趋于密实, D_f 逐渐增大(表 1),矿物形态从浸染状、星散

状或放射状逐渐过渡到团块状,但与吸附距离不同的是,填充间隔表现为粒子的自由活动能力, s 越小,粒子自由活动能力越好,只有在非常靠近 DLA 集团时才被控制, s 较大时,粒子自由活动能力相对较差,距离 DLA 集团较远时就被控制,表现与矿物生长体系的环境温度有关, s 的增大对应于温度的降低。

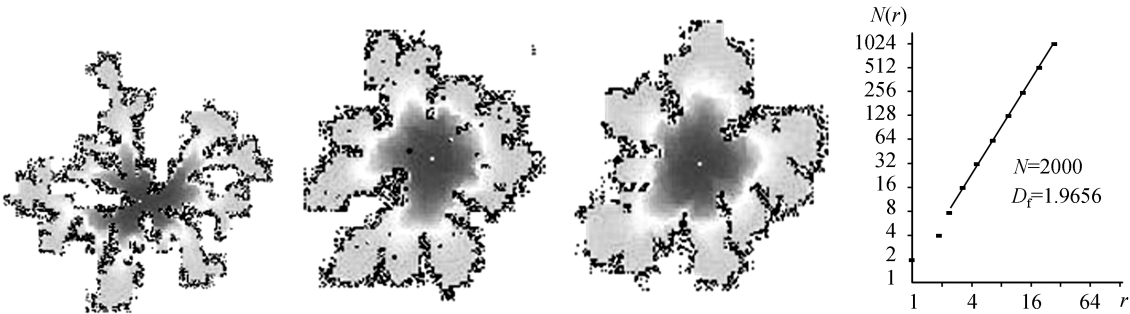


图 3 s 为 0.10、2.00、4.00 时的分形生长模拟及 s 为 2.00 时的 $\text{Lnr-LnN}(r)$ 曲线
Fig. 3 Fractal growth simulation for s is 0.10,2.00,4.00 and the $\text{Lnr-LnN}(r)$ curve for s equal 2.00

3 结 论

通过改进的 DLA 分形生长模型对单矿物生长进行模拟,获得了不同形态的 DLA 集团及其分维值与相关模拟参数的变化规律,并结合矿物生长机制对所得模拟结果进行了初步讨论,通过不

同的模拟条件,对各影响矿物的部分因素作用机制进行了研究,获得以下初步结论。

1) 总体表面粘附几率 P_g 可以对矿物微粒的沉淀概率进行模拟;随着 P_g 的升高,模拟中所得到的 DLA 集团逐渐开放, D_f 逐渐变小,矿物形态从团块状逐渐过渡到浸染状、(下转第 91 页)

(上接第 36 页)

星散状或放射状。

2) 吸附距离 d 可以用来模拟离子的电价, 离子半径等因素在矿物生长体系中的作用; 随着 d 的增大, DLA 集团逐渐密实, D_f 逐渐增大, 矿物形态从浸染状、星散状或放射状逐渐过渡到团块状。

3) 填充间隔 s 可以用来模拟环境温度对矿物生长体系的影响; DLA 集团形态随着 s 的增大趋于密实, D_f 逐渐增大, 矿物形态从浸染状、星散状或放射状逐渐过渡到团块状。

当然, 这只是对三维空间中矿物生长的二维平面模拟, 和实际的矿物的自然生长相比只是一个二维简化, 它并不能完全反映整个矿物在三维空间中聚集生长的复杂动力学。

参考文献:

- [1] Sander L M. Fractal growth processes[J]. Nature, 1986, 322:789-793.
- [2] Witten T A, Sander L M. Diffusion limited aggregation: a kinetic critical phenomenon[J]. Physics Review Letters. 1981, 47:1400-1403.
- [3] Meakin P. Diffusion controlled cluster formation in 2-6

dimensional space[J]. Physics Letters A, 1983, 27:1495-1507.

- [4] Tang C T. Diffusion-limited-aggregation and the Saffman-Taylor problem[J]. Physics Letters A, 1985, 31:1977-1979.
- [5] Meakin P, Ball R C. Structure of large two-dimensional square lattice diffusion limited aggregates: Approach to asymptotic behavior [J]. Physics Letters A, 1987, 35: 5233-5239.
- [6] Tokuyama M, Kawasaki K. Fractal dimensions for diffusion-limited aggregation [J]. Physics Letters A, 1984, 100:337-340.
- [7] Meakin P. Diffusion-controlled cluster formation in two, three, and four dimensions[J]. Physics Letters A, 1983, 27:604-607.
- [8] 吴锋民, 朱启鹏, 施建青, 等. 有限步扩散反应置限分形聚集[J]. 物理学报, 1998(4):15-23.
- [9] Murphy W M, Oelkers E H, Lichtner P C. Surface reaction versus diffusion control of mineral dissolution and growth rates in geochemical processes[J]. Chemical Geology, 1989, 78(3/4):357-380.
- [10] 陈村元, 欧阳健明. 温度变化对草酸钙晶体生长的影响[J]. 人工晶体学报, 2006(2):310-314.