



国防特色学术专著·核科学与技术

地球化学和成矿 体系自组织

DIQIU HUAXUE HE CHENGKUANG
TIXI ZIZUZH

谭凯旋 谢焱石 周泉宇 曾 晟◎著

 哈尔滨工程大学出版社
Harbin Engineering University Press

北京航空航天大学出版社

北京理工大学出版社

哈尔滨工业大学出版社

西北工业大学出版社



国防特色学术专著·核科学与技术

地球化学和成矿体系自组织

谭凯旋 谢焱石 周泉宇 曾 晟 著

哈尔滨工程大学出版社

北京航空航天大学出版社 北京理工大学出版社
哈尔滨工业大学出版社 西北工业大学出版社

内容简介

本书介绍地球化学和成矿体系中的主要自组织现象和动力学机理。研究了矿物溶解和生长的自组织现象和动力学机理;研究了我国华南地区热液铀矿床和湖南水口山铅锌金多金属矿床的断裂构造与矿床空间分布的分形与多重分形特征、矿体厚度和品位变化的分形和混沌特征、元素分布的分形特征;研究了地球化学过程中多种因素与多种过程的耦合与反馈关系;建立了地球化学与成矿体系的多过程耦合的动力学模型和数值模拟方法;模拟研究了华南铀矿床和水口山铅锌金多金属矿床的成矿动力学过程和自组织动力学机制;研究了新疆阿尔泰造山带与云南兰坪盆地演化的非线性动力学机理、原地溶浸采铀过程的自组织特征和动力学机制。

本书对从事地球化学、成矿动力学、铀矿地质、溶浸采铀(矿)以及非线性科学理论与应用等相关专业的研究人员均有重要参考价值,也可供相关专业的高年级学生和研究生参考。

图书在版编目(CIP)数据

地球化学和成矿体系自组织/谭凯旋等著. —哈尔滨:
哈尔滨工程大学出版社, 2009. 8
ISBN 978-7-81133-540-8

I. 地… II. 谭… III. ①地球化学-自组织理论②成矿-
自组织理论 IV. P59 P611

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 155129 号

地球化学和成矿体系自组织

谭凯旋 谢焱石 周泉宇 曾 晟 著
责任编辑 杨秀华

*

哈尔滨工程大学出版社出版发行

哈尔滨市南岗区东大直街 124 号(150001) 发行部电话:0451-82519328 传真:0451-82519699

<http://hrbeu.edu.cn> E-mail:heupress@hrbeu.edu.cn

哈尔滨工业大学印刷厂印装 各地书店经销

*

开本:787×1092 1/16 印张:13.5 字数:319 千字

2009 年 9 月第 1 版 2009 年 9 月第 1 次印刷 印数:1000 册

ISBN 978-7-81133-540-8 定价:44.00 元

前 言

随着科学技术的快速发展,人们发现自然界和社会生活中广泛存在远离平衡态的非线性现象和非线性过程,并导致在 20 世纪 70 年代前后产生了自组织理论、耗散结构理论、协同学、突变论、分形、混沌和超循环理论等一系列探索非线性和复杂性的新理论,这些非线性理论统称为非线性科学。非线性科学为研究复杂现象提供了新的思维方式和解决问题的新方法,并在自然科学和社会科学的众多领域得到广泛的应用。

地球化学系统是开放的和非平衡的非线性复杂系统。地质作用、地球化学作用和成矿作用也都是复杂的非线性动力学过程,受到多种因素的非线性耦合作用,并具有开放体系和远离平衡态两个显著特征。因此非线性科学从诞生起就与地球科学有着密切的关系,一些非线性理论起源于对地学现象的研究,如分形理论最初开始于对海岸线的研究。20 世纪初一些学者(如 Knopf, 1908; Liesegang, 1913, 1915; Hedges and Myers, 1922)考察了岩石和矿物中的非平衡现象(如矿物条带),并试图说明它们是由自组织作用引起的。近 20 年来,地球化学中的非平衡、非线性现象及其动力学成因的研究引起了人们的广泛关注,认识到自组织和其他非线性现象不仅可以出现在所有类型岩石(沉积岩、变质岩和火成岩)和发生在各种过程中(如风化作用、成岩作用、交代作用等),而且可以发生在非常宽广的时、空尺度范围,如晶体中的振荡分带,沉积岩中缝合线构造、变质分异层理、矿床分带、沉积盆地中的巨型流体分隔间等。

成矿系统是地球物质系统的组成部分,成矿作用既是地质作用的特殊产物,又是一种重要的地质过程。成矿作用是各种转变过程(如矿物相变、化学反应)、各种输运过程(如流体流动、质量迁移、能量输运、动量传递等)和力学过程(如应力、应变和构造变形)的耦合,也就是反应-输运-力学(Reaction-Transport-Mechanism, 简称 RTM)的耦合与反馈作用。如流体-岩石反应影响成矿流体的形成和金属矿物沉淀,构造(压溶作用)和热影响反应的进行,岩石的矿物、化学组成直接影响流体-岩石的反应;构造变形(如断裂、压实作用)影响岩石的渗透率、流体流动汇聚与成矿,变形受岩石结构与力学性质和应力的控制,同时也受流体(压力)和流体-岩石反应(填充断裂空间和断裂愈合)的影响。流体-岩石反应可影响岩石的矿物组成、结构和力学性质,进而又影响到构造变形,断裂中流体活动产生矿物沉淀可堵塞流动通道和导致断裂的愈合并进一步影响成矿的寿命和矿床规模大小。因此,成矿作用和成矿体系与很多其他地质体系一样,是非平衡的和非线性的动力学过程,必须从多过程、多因素的非线性耦合作用来研究成矿作用的动力学过程和动力学机制。

铀是重要的国防战略物资和核电原料。随着我国国民经济的发展,国家提出了“积极推进核电建设”的基本方针,计划到 2020 年要新建 60~80 座百万千瓦级的核电站,这将对核燃料铀产生巨大的需求。因此不仅急需研究铀成矿理论,寻找铀矿资源基地,而且急需研究和发展新的采铀理论和技术。从 20 世纪 50 年代开始,美国和前苏联开始研究一种新的采铀理论和方法,即原地溶浸采铀技术。原地溶浸采矿(In situ leaching mining,简称地浸采矿)又称为化学采矿,是将溶浸液通过钻孔直接注入地下含矿岩层中,利用矿物与水溶液的化学反应来获取有用金属和化合物,这是一种集采矿、选矿、冶金于一体的新的采矿理论和采矿方法,是一门涉及地质、地球化学、水文地质、采矿学、湿法冶金学、物理化学、流体力学等多学科交叉的边缘科学。由于地浸采矿不需井巷工程,生产成本较低,对地表生态环境破坏小,能适用于低品位矿产资源的开采,因此,国内外对溶浸采矿技术的研究与应用日益重视。目前在很多有色金属、贵金属、稀有金属矿床中都在逐渐研究和应用地浸采矿技术,其中应用最广泛和成功的尤其是铀矿床的溶浸开采,在美国、澳大利亚、前苏联国家、伊朗等许多国家都建成了地浸采铀矿山。地浸技术被誉为世界地质矿产业一次重大的技术革命,美国国家研究委员会 1993 年将其列入固体地球科学的重要研究领域。我国于 20 世纪 90 年代在新疆伊犁 512 铀矿成功地建成了第一座地浸采铀矿山,目前已建成多座。从理论上讲,地浸采铀过程是一种人为的水-岩反应过程,是一种典型的孔隙介质中流体流动、溶质迁移与化学反应的耦合过程。

鉴于上述,本书在简要介绍自组织基本理论的基础上,分析总结了地球化学和成矿体系中的主要自组织现象和动力学机理;研究了矿物溶解和生长的自组织现象和动力学机理;研究了我国华南地区铀矿床和湖南水口山铅锌金多金属矿床的断裂构造与矿床空间分布的分形特征、矿体厚度和品位空间变化的分形特征;研究了地球化学过程中多种因素与多种过程的耦合与反馈关系,建立了地球化学与成矿体系的多过程耦合的动力学模型和数值模拟方法;模拟研究了华南热液铀矿床和湖南水口山铅锌金多金属矿床的成矿作用的动力学过程和自组织动力学机制;研究了新疆阿尔泰造山带与云南兰坪盆地演化的非线性动力学;研究了原地溶浸采铀过程的自组织特征和动力学机理。

本书主要包括了国家自然科学基金项目“地球化学和成矿体系中的非线性耦合与自组织(编号:70171057)”、湖南省自然科学基金项目“湘南地区铀矿成矿作用的复杂性和自组织(编号:06JJ20070)”和湖南省教育厅重点项目“溶浸采矿中的非线性科学研究(编号:03A042)”等三个项目的研究成果。研究期间还得到国家留学基金委员会的资助前往挪威奥斯陆大学作访问研究。在课题的研究过程中得到许多单位和专家的帮助、指导,特别是中国科学院地球化学研究所欧阳自远院士、胡瑞忠研究员、中国科学院广州地球化学研究所刘顺生研究员、中南大学

戴塔根教授、南华大学邹树梁教授、丁德馨教授、挪威奥斯陆大学(University of Oslo)地球科学系 N. R. Sæltun 教授、P. Aagaard 教授和许崇育教授等给予了指导、帮助和有益建议。参加部分研究工作的还有刘泽华教授、夏良树教授、黄晓乃副教授以及博士生刘栋、易正戟,硕士生王世强、何海、曹兵、赵贺永、赵龙云等。在此谨对以上单位、专家和参加研究工作的同志一并表示衷心的感谢!由于作者水平有限,难免存在不妥甚至错误之处,敬请广大专家、学者批评指正。

谭凯旋

2009 年新春于衡阳南华大学

目 录

第1章 概论	1
1.1 自组织理论简介	1
1.2 地球化学自组织现象概览	12
1.3 地球化学自组织的耦合与反馈作用	18
第2章 矿物溶解和生长自组织	25
2.1 金属硫化矿物溶解反应的非线性动力学	25
2.2 矿物振荡分带与生长自组织	36
2.3 矿物生长形态不稳定性与自组织	47
2.4 条带构造形成的自组织	53
第3章 地球化学和成矿体系的分形和混沌特征	57
3.1 华南铀矿的分形特征	57
3.2 水口山矿区断裂构造的分形特征	68
3.3 元素分布的分形与混沌特征	76
第4章 地球化学和成矿过程的动力学模拟	94
4.1 动力学模型与数值方法	94
4.2 华南地区铀成矿动力学	110
4.3 水口山铅锌金多金属成矿动力学	119
4.4 造山带演化动力学模拟	134
4.5 沉积盆地演化动力学模拟	141
第5章 地浸采铀(矿)的非线性耦合与自组织	147
5.1 地浸采铀(矿)技术概论	147
5.2 地浸采铀(矿)过程的耦合、反馈与自组织	154
5.3 地浸采铀(矿)动力学及其模拟	163
参考文献	192

第1章 概 论

1.1 自组织理论简介

1.1.1 自组织

自组织(Self-organization)是指一个体系在没有外来模板(Template)干扰时,由非模式态向模式态的自发转化。导致自组织的原因是非平衡和非线性反馈。一个系统发生“自组织”是指在该系统内自发产生某种空间上、时间上或功能上的有序结构。它具有以下几个特点:(1)系统发生自组织并出现特定有序结构(时间结构,空间结构,功能结构)的条件是系统必须开放,而且必须维持远离平衡状态;(2)自组织是自发产生的;(3)系统发生自组织时,外部影响具有总体性;(4)总体外部影响向系统内部的自组织和有序结构的“转化”是通过系统内部的联结和相互作用而实现的。

地球化学过程中存在着大量的时-空有序现象,例如,许多岩石和矿物中某些组分的浓度随空间呈周期性的变化,导致岩石中显现周期性的有序花纹。现在已有许多证据表明,这种周期性现象并不是由外界环境的周期性变化引起的,而是由地球化学过程的内在机制(例如化学反应和输运过程或热传导过程)引起的。因此这类现象属于自组织现象。地球化学自组织可以出现在所有类型岩石(沉积岩、变质岩和火成岩)和发生在各种过程中(如风化作用、成岩作用、交代作用等)。

布鲁塞尔学派的普里高津及其合作者长期致力于自组织的研究,认识到自组织是严格的非平衡现象,并进一步提出了耗散结构理论。耗散结构(Dissipative structure)就是指系统在远离平衡条件下,通过各子系统相互作用,自组织超越临界状态后形成的一种靠能量流和物质流来维持的有序结构。耗散结构具有以下一些基本特征:(1)系统都是非孤立的,并且处于远离平衡的非平衡状态;(2)当某一参量增长达到一定阈值时,原定态失稳,出现临界状态,并形成一个新的定态,过程是自发进行的,称为自组织;(3)新的定态相对于旧的定态更为有序,是无序到有序的相变,称为非临界状态下的有序化转变;(4)通过临界点形成有序结构后,对称性降低,称为对称破缺;(5)系统近临界点时,因涨落而偏离定态后,恢复至定态所需的时间(驰豫时间)无限增长,称为“临界减慢”现象;(6)新的有序结构(耗散结构)靠物质流和能量流来维持。

自组织临界性理论(Self-organized criticality)最早由Bak等(1988)在20世纪80年代末提出,认为有序性是一种大的相互作用系统处于自组织临界状态的结果。所谓自组织临界状态,是指一个开放的耗散系统,由于组成系统的各个组元之间的相互作用,而自然地无需由外部加以调整地从随机状态演化到一种有组织的临界状态。自组织临界性的涌现机制主要有以

下几种:(1)多组成及作用过程的非线性相互作用的多重耦合与叠加;(2)自组织临界性的形成具有“元胞自动机”的动力学机制;(3)时空分形和长程时空关联与连通性;(4)自组织临界性涌现于混沌边缘。

自组织是开放复杂系统的基本属性。自组织的理论含义在于:如果向系统注入能量使得一定的参数达到某个临界值,系统往往会自动形成某种秩序和模型。通俗地讲,当系统演化无需外界的特定制约、仅依靠系统内部各要素的相互协调便能达到某种目标时,我们说系统是自组织的。早期的科学家们提出“自组织”这一概念的原因主要在于,发现了系统演化的一个特性,即非因果律(Noncausality)。也就是说,在一定条件下,作用于系统的外在力量并不能决定系统的内部行为,而是激励系统自发形成某种有序组织的内在、独立过程。后来的研究涉及到更为复杂的系统演化机制。今天,与自组织有关的概念包括非线性(Nonlinearity)、复杂性(Complexity)、对称破缺(Symmetry breaking)、非平衡(Non-equilibrium)、不稳定(Instability)、分形(Fractal)与混沌(Chaos)等众多术语。自组织理论包括耗散结构论、协同学、超循环理论、突变论、混沌理论、分形理论、细胞自动机理论等,这些理论构成了强大的自组织学科群。

1. 非平衡条件

非平衡是发生自组织的必需条件。系统是怎样被驱动离开平衡的呢?非平衡是由初始条件和边界条件决定的。为了说明这两个因素怎样引起非平衡,下面借用化学工程的两个理想情况来说明。

(1) 批模式

批模式(Batch Mode)化学过程是在容器中放入反应物,允许反应持续进行直到产生足够的所需生成物。在该模式中,因为初始组分是不平衡的,相关化学过程才得以发生。原则上,该模型也能通过如下步骤进行:①在一定温压条件下的平衡体系中加入反应物;②改变体系的初始参数。以上两种情形都表明,批模型是通过系统的初值改变达到偏离平衡态目的。一个经典的化学自组织实验例子是 Belousov - Zhabotinsky 反应。地球化学过程中与批模型类似的非平衡情况很多,如,a. 岩浆从深部注入到温压都比岩浆本身低的主岩中,尔后发生等化学的冷却;b. 在应力作用下,处于无物质交换的岩石仍会与环境发生作用,即应力驱使系统离开平衡态并仍然通过压溶和晶格缺陷的方式使岩石溶解和沉淀,外界环境提供机械能,体系中产生的热被带出。

(2) 交换模式

交换模式(Exchange Mode)是通过反应物与生成物连续与外界交换,来推动和保持系统的非平衡。该模式是通过边界条件来对系统施加影响。如搅拌箱反应器,该反应器由反应物进口、反应室和出口组成(图 1.1),由于连续的反应物输入和生成物输出使反应室产生非平衡条件。

地质系统发生从平衡态向远离平衡态方向偏离可通过多种方式来达到,主要的非平衡驱动力包括地球内部的热流、太阳辐射、能量

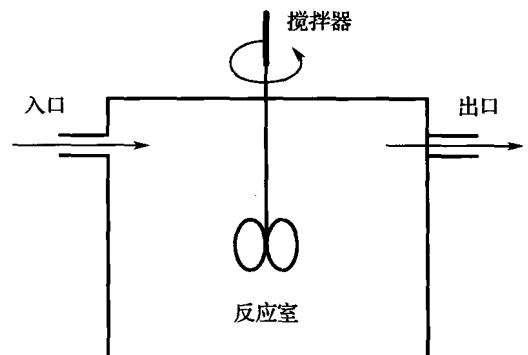


图 1.1 搅拌箱反应器

向自由空间的耗损和系统外施加的重力和应力,而对揭示自组织现象更有启发性的是分析更小规模的过程。

考虑如下交换模式产生非平衡的例子,来阐明广义情形下地球化学自组织的发生。在一个含水层中,水被连续注入并且使水与岩石中的某些矿物之间处于非平衡态,从而形成一个运动的反应带(图1.2)。当水流通过该带时,可能与原有矿物发生反应形成新矿物,而这些新矿物与水处于平衡状态。这样,在反应带内,矿物的溶解与沉淀始终保持在非平衡态。

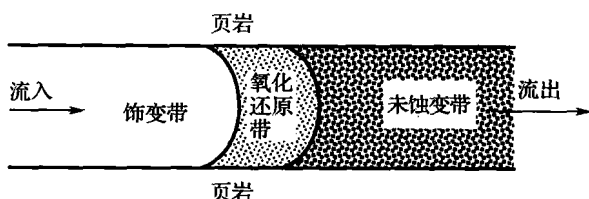


图 1.2 非平衡的水-岩反应带

2. 反馈、不稳定性 and 分歧

自组织的发生是非模式态的小偏离被增强、放大的结果。反馈导致非模式态的不稳定性和模式态的发展。反馈系统存在一个临界条件,超出该临界条件就产生新的状态,新状态的振幅取决于体系的非线性反馈。

反馈包括正反馈和负反馈。正反馈循环是一系列结束于它本身的过程,每一个过程通过循环中的其他过程来促进它自己(例如 A 促进 B, B 促进 C, 然后 C 又促进 A 等)。相反,负反馈循环可用如下系列表示: A 促进 B, B 促进 C, C 则趋向于抑制 A 等。负反馈循环由于具有时间延滞,可以引起时间振荡序列。

最简单的化学反馈形式是自催化,如图 1.3 所示。反应物 A 注入体系中,然后 A 转化为 X。如果体系中 X 的存在促进 A→X 反应的速率,则发生了反馈作用。X 产生 X 的促进作用(虚线表示)称为自催化。

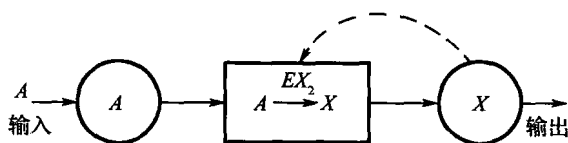


图 1.3 X 自催化产生和由络合物 EX_2 催化产生的流程图

在反应网络中,自催化可以通过被 X 活化的酶(E)的媒介作用实现。考虑如下反应网络



活化酶促进 A→X 反应但不是被它消耗。该网络引起的反馈结构如图 1.3 所示。

在搅拌箱反应器中这些反应网络可维持 X 产物的多重态。如果一个态 [X] 很低,则 $[EX_2]$ 也很低,因此反应式(1.2)不能快速进行。但是,如果 [X] 初始就高,反应式(1.2)可维持发生且系统达到高 X 产生速率的状态。很明显,这个状态多重性取决于体系的控制参数,包括 A 的注入速度、X 的去除速度、反应速率系数和体系中 E 的总量等。

分歧理论(Bifurcation theory)可用来定性和定量分析非线性系统,以确定各类行为发生的参数范围,即在什么情况下原来参考态可能失去稳定性以及在发生不稳定之后会出现什么样的新态。

动力(演化)系统的形态通常用微分方程

$$\frac{dX}{dt} = F(X, \lambda) \quad (1.3)$$

来描述,其中 $X \in B$, B 是适当定义的 Banach 空间, λ 是控制参数,它也属于一个合适的空间。动力系统式(1.3)的稳定解 X 用方程

$$F(X, \lambda) = 0 \quad (1.4)$$

来定义,其中参数 λ 的值为已知。

我们必须研究动力系统的稳态解与参数 λ 值的依赖关系。假设 $\lambda \in R^1$, 并设

$$\lambda = \alpha \in R^1$$

我们把一个连续的和唯一的依赖关系 $X(\alpha)$ 定义为解的一个分支。所谓唯一性就是指对于每一个固定的 $\alpha \in (\alpha_0, \alpha_1)$, 我们只能找到一个解 $X(\alpha)$, 或者说, 若方程式(1.4)还存在另一个解 $X_1(\alpha)$, 则我们能够找到 $\varepsilon > 0$, 使得

$$\|X_1(\alpha) - X(\alpha)\| < \varepsilon \quad (1.5)$$

成立。如果解的分支在参数 (α_0, α_1) 的两个方向上连续, 那么, 在这些参数的变化范围内, 唯一性不再成立。这样的临界点称为分支点。

当 λ 值在某一范围内时, 解 X_s 随 λ 的变化而平滑地变化, 即解在热力学分支上, 当 λ 的值达到临界值 λ_c , 热力学分支会失去稳定性, 即 $\lambda = \lambda_c$, 以热力学分支为参考态的线性化方程的某个本征值变为零; $\lambda > \lambda_c$, 该本征值变为正, 于是新的分支解可从临界点 λ_c 长出来, 也就是说发生分支现象。各类分支现象可用图 1.4 来表示。随着控制参数的变化, 体系进一步远离平衡时, 各分支解又会改变其稳定性而导致二级分支和高级分支现象。

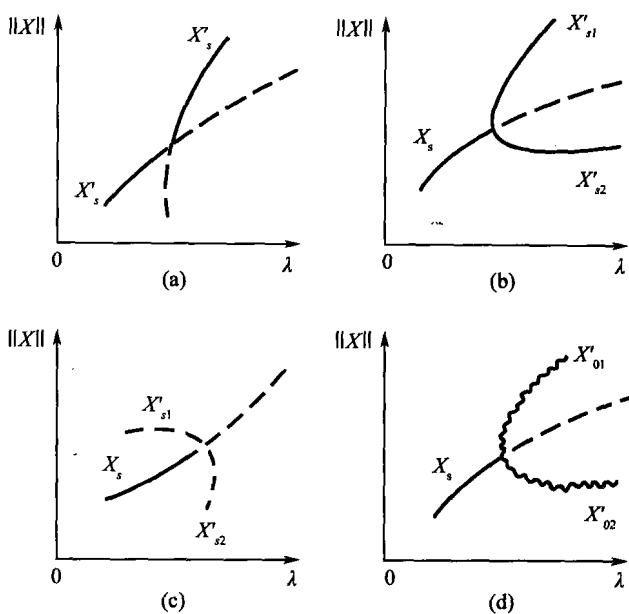


图 1.4 从定态解 X 通过一个简单的本征值发生的分支现象

(a) 有一个定态分支解 X_s ; (b) 有两个稳定的定态分支解 X'_{s1} 和 X'_{s2} ; (c) 有两个不稳定的定态分支解 X'_{s1} 和 X'_{s2} ; (d) 有一个极限环型分支解 X'_0 , 其中 X'_{01} 和 X'_{02} 仅相差某个位相。图中—表示稳定的; -- 表示不稳定的; ~ 表示随时间周期振荡的

1.1.2 分形理论

分形几何学 (Fractal geometry)

是非线性科学的重要内容之一, 它是由法裔美籍数学家曼德尔布罗特 (Mandelbrot B B) 于 20 世纪 80 年代初创立的一门新的几何学, 它为研究自然界的 irregular 形状和复杂过程提供了新的定量方法。地球化学自组织现象 (包括其他非线性现象) 具有分形结构特征, 同样可采用分形理论进行研究。

“分形 (Fractal)” 的原意是 “不规则的、分数的、支离破碎的” 物体。1990 年, Falconer 在他的专著 *Fractal geometry, mathematical foundations and applications* 中认为分形的定义虽然比较困难, 但可以将分形集的一些特征罗列出来予以说明。他认为分形集具有如下五个特征: (1) 具有精细结构; (2) 具有高度的不规则性; (3) 具有某种程度上的自相似性; (4) 维数大于它的

拓扑维数;(5)分形集的生成方式很简单,比如可由递归的方式生成。

对分形的度量是分形维数,简称“分维”,分维是分形理论中一个十分重要的基本概念。但是因为分形的确切定义没有给出,所以分维也难以确切定义,缺乏统一的计算公式与算法。分形和分维具有几个基本性质:(1)自相似性。指事物的局部(部分)与整体在形态、信息和功能等方面具有统计意义上的相似性。(2)标度不变性。指适当放大或缩小分形对象的几何尺寸,整体结构并不改变。(3)无标度区特性。指自然现象的分形特征只有在一定的尺度范围内和在一定的层次中才能表现出来,这个具有自相似性的范围称为“无标度区”。(4)相对于欧氏几何学中只存在整数维,分维几何中的维数可以是整数,亦可以是分数。(5)自然界中的分形常常是具有自相似分布特征的随机现象,因此,必须采用概率统计的方法进行分析与处理。目前常用容量维、信息维、关联维,以及 Renyi 维数等来刻画和度量分形集的复杂程度。

1. 特征尺度变换法(或标度变换法)计算分维

以特征尺度 r 度量研究对象,其量度值为 N ,如 N 与 r 具有幂定律关系,则根据幂指数可得出分维值 D ,长度或数量的统计分形方程为

$$N = Cr^{-D} \quad (1.6)$$

体积或质量频率分布的分形方程为

$$N \propto M^{-D/3} \quad (1.7)$$

在实际分析中,取一系列不同数量级的 r 值,分别测出相应的不同值 N ,在双对数坐标图上绘出 $\ln N$ 对 $\ln r$ 的曲线,其拟合直线部分的斜率的绝对值就是分维值 D ,这一斜率可用最小二乘法求出。对于体积或质量分布分形,则分维值 $D = -3 \times \text{斜率}$ 。

2. 容量维 D_0

容量维又可称作盒维数(Box-counting dimension),实际上是 Hausdorff 维数 D_0 的一种具体实现,其定义是以覆盖为基础的。其具体分析方法是,以边长为 r 的正方形格子构成二维正交网格去覆盖研究区域,在不断改变长度 r 的取值下,分别计算出研究对象所分布的网格数 $N(r)$ 。若 $N(r)$ 与 r 满足如下幂定律关系

$$N(r) = Cr^{-D} \quad (1.8)$$

C 为常数,则研究对象为分形, D 为分维值。显然,若在双对数坐标中 $N(r) - r$ 图为一一直线,则该直线的斜率为 $-D$,也即为容量维 D_0 ,这就是通常所称的数盒子法。

3. 信息维 D_1

如果不像容量维定义中仅仅考虑覆盖所需求的个数 $N(r)$,而是考虑分形集的元素在覆盖中出现的概率,便可得到信息维 D_1 。假定将分形体用边长为 r 的正方形分割为 $N(r)$ 份,若分形集的元素出现在第 i 个单元的概率为 P_i ,则根据信息论,这时的总信息量为

$$I(r) = - \sum_{i=1}^{N(r)} P_i(r) \ln P_i(r) \quad (1.9)$$

其中, $\sum_{i=1}^{N(r)} P_i(r) = 1$ 。若变化 r ,则有 $I(r) = I_0 - D_1 \ln r$,从而信息维为

$$D_1 = - \lim_{r \rightarrow 0} \frac{I(r)}{\ln r} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\sum_{i=1}^{N(r)} P_i(r) \ln P_i(r)}{\ln r} \quad (1.10)$$

可见,容量维恰好是等概率情况下($P_i \approx 1/N(r)$)信息维 D_1 的特例, $D_1 \leq D_0$ 。在实际计算中,变换盒子边长 r 值,如果 $I(r)$ 与 $\ln r$ 之间存在线性关系

$$I(r) = -D_1 \ln r + I_0 \quad (1.11)$$

则可由直线的斜率求出信息维数 D_1 。

4. 关联维数

关联维数的定义为

$$D_2 = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\ln C(r)}{\ln r} \quad (1.12)$$

式中的关联函数 $C(r)$ 为

$$C(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \theta(r - |x_i - x_j|) = \sum_{i=1}^N P_i^2 \quad (1.13)$$

式中, θ 为 Heivist 函数。

具体计算时,对一时空系列数据 $t_1, t_2, \dots, t_s$, 可以按以下规则进行相空间重构。取前 m 个数据 $t_1, t_2, \dots, t_m$, 记为 $r_1 = (t_1, t_2, \dots, t_m)$, 去掉 t_1 , 再往下取 m 个数据 $r_2 = (t_2, t_3, \dots, t_{m+1})$, 一直取到 $r_N = (t_N, t_{N+1}, \dots, t_{N+m-1})$, 其中 $s = N + m - 1$, 共有 N 个点 $r_1, r_2, \dots, r_N$, 给定一个数 r , 然后检查有多少点对 (r_i, r_j) 之间的距离小于 r , 把距离小于 r 的点对数 $N(r)$ 占总点对数 N^2 的比例记作 $C(r)$, 适当地缩小尺度 r , 可在 r 的一段区间内有 $C(r) = r^D$ 。对每一不同的 m , 可以获得一系列的 $(r, C(r))$ 数据对, 我们以 $\lg r$ 对 $\lg C(r)$ 作图, 求出对应每一个 m 值的 D , 若随着 m 的增大 D 值将达到一个饱和值, 则该 D 值即为关联维数。

5. 多重分形分析

随着分形理论不断发展, 现已经从单分形扩展到多重分形的研究。多重分形是由单分形集合构成的非均匀分布多标度分形集合。多重分形在空间上包含所有具有连续分维谱的分形, 从多重分形模式中可以推导出具有不同分维值如容量维、信息维、关联维等的各种分形模式。Evertsz 和 Mandelbrot (1992) 认为分形主要应用于物体的集合, 而多重分形应用于测量之中。对于具有几何支撑的连续随机空间分布变量, 这种支撑可以由通过 k -维空间 $\mathbb{R}^k$ ($k=1, 2, 3$) 分割产生的许多单元组成。假设每一个单元都可以看作一个集合, 那么测量可假设为具有一组空间物体的单元中集合的交叉, 这些空间物体包括点、线段、面积体等。假设 $\mu(S)$ 表示集合 S 在 $\mathbb{R}^k$ 中的测度, 将研究区划分为边长为 r 的正方形单元格子, 边长为 r 的第 i 个单元中的信息量为 $\mu_i(r)$, 则分配函数 $x_q(r)$ 定义为

$$x_q(r) = \sum_{i=1}^{N(r)} \mu_i^q(r) \quad (1.14)$$

式中, $N(r)$ 是边长为 r 的单元总数; q 为任意实数, $-\infty \leq q \leq \infty$ 。

如果测度 $\mu_i(r)$ 服从多重分形模式, 对于任何 $x_q(r)$ 方程 (1.14) 分配函数与单元大小 r 具有简单的幂定律关系

$$x_q(r) \propto r^{\tau(q)} \quad (1.15)$$

式中, $\tau(q)$ 为 q 阶矩的幂指数(标度指数)。

如果满足多重分形假设, 在 $x_q(r)$ 对 r 的双对数图中构成一系列的直线, 每一个 q 值对应一条直线, 每一条直线的斜率给出一个 $\tau(q)$ 值。对于单分形也可以获得一组直线, 但是对任何 q 值, 所有的 $\tau(q)$ 值为一常数, 或者 $\tau(q) = -\tau(-q+2)$ 。

多重分形的多重分维值 D_q 可由 q 阶矩的幂指数 $\tau(q)$ 求出

$$D_q = \tau(q)/(q-1) \quad (1.16)$$

如果 r 较小, 表述测量本身自相似性的关系式

$$\mu(r) = r^\alpha \quad (1.17)$$

可用来定义奇异指数 α 。具有相同 α 值的所有小区域组成一个分维为 $f(\alpha)$ 的分形子集, 对于具有相似性的多重分形, α 为 q 的函数 $\alpha = \alpha(q)$, 由(1.15)和(1.17)可得出

$$\alpha(q) = \frac{d\tau(q)}{dq} \quad (1.18)$$

在实际分析中, 可根据已计算出的邻近点的 $\tau(q)$ 值来计算其 $\alpha(q)$ 值, 假定 $\tau(q_{k-1})$, $\tau(q_k)$ 和 $\tau(q_{k+1})$ 为 τ 的连续估算值, 则 $\alpha_k(q)$ 值由下式获得

$$\alpha_k(q) = \frac{\tau(q_{k+1}) - \tau(q_{k-1})}{q_{k+1} - q_{k-1}} \quad (1.19)$$

在单分形中, 对所有的 q 值, 其 $\alpha(q)$ 都相同; 而在多重分形中, 分维谱函数 $f(\alpha) = f\{\alpha(q)\}$ 具有如下形式

$$f(\alpha) = q\alpha(q) - \tau(q) \quad (1.20)$$

分维谱 $f(\alpha)$ 曲线上的每一个点代表了具近似相同的奇异指数 α 的 S 子集的分维值。 $q=0$ 时, $f(\alpha)$ 达到最大值 $f_{\max}\{\alpha(0)\} = -\tau(0)$, 对应于盒维数 D_0 ; 在二维集合中, $f_{\max}\{\alpha(0)\} \leq 2$, $q=1$ 时的 $f\{\alpha(1)\}$ 就是信息维 D_1 。

如果研究区域形状不规则, 则可能出现边缘效应, 即位于边缘的某些单元格子的面积将大于或者小于正常单元格子的面积 $a=r^2$, 这将影响分形分析的精度。为此在分析中必须进行面积校正。此时, 对位于研究区边缘的非标准单元还测量出每个单元的面积 a_i , 面积校正值 $w_i = a_i/a$, 从而(1.14)式可修正为

$$x_q(r) = \sum_{i=1}^{N(r)} [\mu_i(r)/w_i]^q \quad (1.21)$$

这样使大于标准单元面积的那些单元的测量值减小, 而使小于标准单元面积的那些单元的测量值增大。

显然, 对于多重分形来说, 标度指数 $\tau(q)$ 和多重分维 D_q 都是从整体上来描述多重分形的特征, 而只有奇异指数 α 和分维谱函数 $f(\alpha)$ 才能表述多重分形的局部特征。

1.1.3 混沌理论

混沌理论是 20 世纪 60 年代出现的一种新理论。美国气象学家洛伦兹(Lorenz E N)在他的计算机上计算了一个重力场中热对流问题的简化模型, 结果发现, 初始条件的微小变化很快就导致了完全不同的运动状态, 即在确定论系统中, 相空间轨道有可能呈现高度不稳定性, 随

着时间的发展,相邻的相空间轨道之间的距离可能按指数规律增大,这种现象被称为确定论系统中的内在随机性,通常称为混沌(Chaos)。1975年,美国数学家李天岩(Li)和约克(York)将洛仑兹的发现一般化,提出了著名的李-约克定理,从而正式定义了“混沌(Chaos)”的概念。

关于混沌的定义,有多种方法,目前使用较广的是一种拓扑方法的定义:设 V 为一集合, $f: V \rightarrow V$ 称为在 V 上是混沌的,如果,(1) f 有对初始条件的敏感依赖性;(2) f 是拓扑传递的;(3)周期点在 V 中稠密。混沌的映射具有三个要素:不可预测性;不可分解性和潜在的规律性。

自然界中的现象都是在一定的时间和空间中出现的,对于复杂的时空动力系统,不仅在时间方向上具有混沌行为,而且在系统长时间发展以后,其空间方向上也具有混沌行为,这称为时空混沌(Spatiotemporal chaos)。

1. 混沌吸引子

确定性耗散系统经长时间演化后总趋于稳定的状态归宿,称为吸引子。它们可分为四种,定常吸引子、周期吸引子、准周期吸引子和奇异吸引子。在相空间中分别对应于不动点、极限环、环面和奇异吸引子。吸引子的维数可以是整数,但总小于相空间的维数。当吸引子的维数为0时,系统的演化将不随时间变化而处于稳定;当吸引子的维数为1时,系统的演化随时间作周期振荡;当吸引子的维数为2时,动力系统将随时间作具有两个不可约频率的拟周期振荡;如果吸引子的维数为分数或大于2,动力系统将随时间作持续的非周期振荡即混沌振荡,这种具分数维的吸引子称为混沌吸引子或奇异吸引子。

利用实验或分析中所得的时(空)系列数据,可以计算出该动力系统的状态吸引子的维数,进而分析其动力学特征。

首先,对时间系列数据构造出适当的相空间。相空间由下述变量定义

$$x(t), x(t+\tau), \dots, x[t+(n-1)\tau]$$

τ 是时间滞后量,它是取样时间间隔的倍数。对于时间系列数据 $x(t_1), x(t_2), x(t_3), \dots, x(t_N)$,选择一适当的时间滞后量 τ ,按 τ 的整数倍逐步把时间系列数据 $x(t)$ 拓展,构造出由 $x(t), x(t+\tau), \dots, x[t+(n-1)\tau]$ 变量组所支撑的并包含下列 N 个点的 n 维辅助相空间

$$\begin{aligned} & x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_N) \\ & x(t_1+\tau), x(t_2+\tau), \dots, x(t_N+\tau) \\ & x[t_1+(n-1)\tau], x[t_2+(n-1)\tau], \dots, x[t_N+(n-1)\tau] \end{aligned}$$

其中 $x_i \{x(t_i), x(t_i+\tau), \dots, x[t_i+(n-1)\tau]\}$ 代表相空间中的一个点。

然后根据下式计算每一拓展的 n 维辅助相空间的吸引子关联函数

$$C(r) = \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \theta(r - |x_i - x_j|) \quad (1.22)$$

式中, $|x_i - x_j|$ 为上述相空间中任意不同的两个相点之间的距离; r 为任意正数; θ 为Heavyside函数

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ 1 & (x > 0) \end{cases} \quad (1.23)$$

当 r 较小时,吸引子的维数 D 与 $C(r)$ 有如下关系

$$C(r) = r^D \quad (1.24)$$

或

$$\ln C(r) = D \ln r \quad (1.25)$$

即吸引子的维数 D 等于 $\ln C(r)$ 对 $\ln r$ 图中的直线斜率。

以 $\ln C(r)$ 对 $\ln r$ 作图,计算出每一维辅助相空间在标度区间的斜率。当增加辅助相空间的维数 n 达到某一值后,如果斜率达到饱和而不再随 n 变化,则该饱和的斜率值即为吸引子的维数;如果吸引子的维数为分数,则为混沌吸引子。首次出现斜率饱和值的辅助相空间维数即为描述该动力系统的相空间维数,也就是模拟该动力系统所需要的最少变量数。

2. 李雅普诺夫指数与混沌的判别

李雅普诺夫指数 (Lyapunov exponent) LE_i 是表征混沌运动轨道的发散速率,也就是表示沿相空间某方向 i 初态偏差随时间增长 ($LE_i > 0$) 或减小 ($LE_i < 0$) 的速率。 $LE_i = 0$ 表示运动处于分岔点上。 d 维相空间吸引子的李雅普诺夫指数 $LE_i (i = 1, 2, \dots, d)$ 的符号可区分上述 4 种吸引子。只有混沌系统才有真正的李雅普诺夫指数。这时,状态轨道的初态偏差迅速放大,称为混沌的初值敏感性。

在各种动力学研究过程中,我们观测获得的常常是某一动力学演化过程的时间系列数据或空间系列数据,事实上。根据时空演化的相关性,我们可以把各种空间上的变化过程视作一个时间上的动力学系统。一个决定论性动力学系统是按照某一确定规则随时间改变的系統。定义系统状态的变量数 m 称为相空间维数。按照变化规则是否关于时间连续,动力学系统可以分为离散的和连续的,很显然,我们测量的许多动力学系统数据都是离散的动力学系统。

离散动力学系统由差分方程或映射给出

$$X_{n+1} = f(X_n), n = 1, 2, \dots \quad (1.26)$$

其中, $X_n = (X_1(n), \dots, X_m(n)) \in R^m$ 是时间变量取整数 n 的 m 维状态矢量。 $f: R^m \rightarrow R^m$ 是 m 维空间中的一个映射,为状态变化规则,一般可以依赖于 k 个控制参数 $\mu_1, \dots, \mu_k$ 。

在离散动力学系统的演化过程中,若系统在 m 维相空间中长时间地渐近运动于一个维数低于 m 的结构上,则称该结构为吸引子。若该吸引子对初始条件具有敏感依赖性,该吸引子即为奇异吸引子。混沌轨道对于初始条件的敏感依赖性是指从两个相近邻的初始条件出发的两条轨道之间的距离将随时间指数地增加,这种敏感依赖性可以用 Lyapunov 特征指数定量地表述。

在各种动力学过程中,当混沌运动出现时,相毗邻的点随着时间的演化将以指数形式相分离。李雅普诺夫指数 $\lambda(x_0)$ 度量了这种分离的强度,该指数是系统出现混沌的一个判据,正的李指数对应混沌态,负的李指数对应周期运动,准周期运动的李指数为零。

从混沌意义上知道,混沌吸引子是整体上的稳定性和局部的不稳定相结合的结果,是伸长和折叠的产物。因此局部不稳定或伸长,使 n 维相空间中至少有一个 Lyapunov 特征指数为正。例如,在三维相空间中,三个 Lyapunov 指数的大小排列为

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \quad (1.27)$$

其中, $\lambda_1 \geq 0$, 代表混沌吸引子。

混沌吸引子是耗散系统的专有特征,是扩散 (Expansion) 与收缩 (Contraction) 两种作用相互牵制的结果。为了维持吸引子的存在,总的收缩率必然要超过总的扩散率。这样,即使在系统具有几个正的李雅普诺夫指数时,如果对整个李雅普诺夫指数谱进行求和,所得结果仍然是负值。因此,在运用轨道跟踪时,我们每次都在最大方向上估计 λ_1 , 然后对所有估计值进行平

均求取 λ_1 。

要计算李雅普诺夫指数,首先要进行相空间重构,重构的相空间是否接近实际未知系统,对系统的进一步刻画具有较大的影响。对于 N 点的标量时间序列 $\{v(t_0 + k^0 \Delta t): k=0, 1, \dots, N-1\}$, 可以用 Takens 嵌入定理去重构相空间

$$X_i = (x(t_i), x(t_i + p^0 t), \dots, x(t_i + (m-1)p^0 t)), i = 1, 2, 3, \dots, M;$$

$$x(t_r) = v(t_0 + (r-1)^0 \Delta t), r = 1, 2, \dots, N$$

这里 X_i 是重构相空间 R^m 中 M 点重构轨迹中的第 i 个点,而 $M = N - (m-1)p$, m 是嵌入维, $\tau = p^0 \Delta t$ 是时间延迟, $\tau_w = (m-1)\tau$ 是时间窗,其中 t 为采样周期,我们需要选择 m, τ 和 τ_w 中的任意两个参数,另一个通过 $\tau_w = (m-1)\tau$ 直接求得。对一具体时间序列,一般选择其平均峰值时间 (mtbp) 作为 τ_w 。另外, τ_w 的大小有一个范围, τ_w 必须满足 $\tau_{w \min} < \tau_w < \tau_{w \max}$, 否则重构将会变坏,其中 $\tau_{w \min}$ 可用 $\tau_{w \min} = (20)^{1/2} \sigma(x) / \sigma(dx/dt)$ 来估计,其中, $\sigma(o)$ 为均方差。

在选择了 τ_w 之后,还要对 τ 和 m 作出选择。由于 τ 的大小与信号自身的相关程度有关,相关程度越低, τ 就越小,因此对带有噪声的信号重构时, τ 不能太大。另一方面,随着 m 的增大, τ 也应减小,当 m 足够大时, τ 就可以选得很小。因此,本文选择最大的 m 而得到最小的 τ , 即 $\tau = \Delta t, p = 1$ 。

综上所述,可采用下列方法来重构相空间:(1)求取原始时间序列的 mtbp, 让 $\tau_w = \text{mtbp}$, 带有噪声的时间序列可经滤波后再求取 mtbp; (2)选择 $p = 1$, 即 $\tau = \Delta t$; (3)根据关系式 $m = \tau_w / \tau + 1$ 计算 m 值。

下一步我们就根据重构好的相空间来计算 λ_1 。假设重构轨迹中的第 i 个点 X_i 的最近邻为 X_{ip} , 即满足 $|X_{ip} - X_i| = \min_j |X_j - X_i|$ 。在这里需要对两点的的时间间隔作出规定,假设 $\tau_w / \Delta t < |j-i| < R\tau_w / \Delta t, 1 < R < 10$ 。 $|j-i| > \tau_w / \Delta t$ 可以保证 X_i 和 X_{ip} 在不同的轨道上。而 $|j-i| < R\tau_w / \Delta t$ 可以保证一次计算 λ_1 所需的点数很少,这样不仅节省了大量的计算时间,而且大大减少了计算时所需的存储空间。 R 可以选择为一个常数,用以避免最近邻之间的距离为零,不可以太大和太小。 R 太小会使最近邻之间的距离受到噪声的影响很大,而 R 太大又会使两个最近邻完全失去相关性,同样可能出现距离为零的情况。

为了能在扩散的最大方向上计算 $\lambda_1(i)$, 可以用下式来求取 $\lambda_1(i)$

$$\lambda_1(i) = \frac{1}{jh \cdot \Delta t} \lg \frac{\|X_{ip+jh} - X_{i+jh}\|}{\|X_{ip} - X_i\|}$$

$$= \max_h \left(\frac{1}{h \cdot \Delta t} \lg \frac{\|X_{ip+h} - X_{i+h}\|}{\|X_{ip} - X_i\|} \right) \quad (1.28)$$

这里需要附加两个条件:

$$(1) 1 < h < a\tau_w / \Delta t, 0 < a < 1;$$

$$(2) \arccos \left(\frac{(X_{ip} - X_i) \cdot (X_{ip+h} - X_{i+h})^T}{\|X_{ip} - X_i\| \cdot \|X_{ip+h} - X_{i+h}\|} \right) < b \cdot 80^\circ, 0 < b < 1, b \propto m。$$

因为时间间隔小于 τ_w 时的两点可以认为是在同一条轨道上,所以条件(1)保证了由最近邻演化后的两点仍然分别保持在各自的轨道上,其中 a 也为常数。然而虽然有了条件(1)的限制,但还不能保证 $X_{ip+jh} X_{i+jh}$ 和 $X_{ip} X_i$ 的方向是基本一致的,用方向上相差比较大的 $X_{ip+jh} X_{i+jh}$ 与 $X_{ip} X_i$ 来计算 $\lambda_1(i)$ 同样是没有意义的。条件(2)就是为了防止在有较大扭曲的轨道中计算 $\lambda_1(i)$, m 越大扭曲的程度越大,因而,限制的角度应相应增大,也即限制的条件应适当放松,但