

博士丛书

分形理论及其 在分子科学中 的应用

李后强 汪富泉 著

科学出版社

博 士 丛 书

分形理论及其在分子 科学中的应用

李后强 汪富泉 著

国家教委资助优秀青年教师基金项目

科 学 出 版 社

(京)新登字 092 号

内 容 简 介

本书扼要介绍了自相似分形、自仿射分形、质量分形、表面分形、多重分形、胖分形及分形维数、谱维数的基本概念。给出了混沌和奇怪吸引子的特征,以及李雅普洛夫指数、关联维数、柯尔莫哥洛夫熵的计算方法,讨论了小波及样条函数在分形理论中的应用。重点报道了蛋白质、酶的分形研究,酶分形动力学、酶模型的分形设计以及高分子和胶束的分形特性。本书是国内外第一本介绍分形理论在分子科学中应用的著作。适合于大学生、研究生阅读,也可供有关科技人员及哲学社会科学工作者参考。

博 士 丛 书

分形理论及其在分子科学中的应用

李后强 汪富泉 著

责任编辑 林 鹏 胡华强

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1993年12月第 一 版 开本: 850×1168 1/32

1993年12月第一次印刷 印张: 10 7/8

印数: 1—2 000 字数: 278 000

ISBN 7-03-003986-6/O·699

定 价 : 12.00 元

序

环顾当今世界，国家的发达，民族的振兴，无一例外地离不开科学技术的推动作用。年轻博士们历来是科技队伍中最活跃、最富创造性的生力军。他们的科研成果是学科发展强有力的推动力量，是体现一个国家高层次教育水平和科研水平的窗口。为了系统地反映年轻博士们的科研成果，促使他们的快速成长，加强国际国内的学术交流，在老一辈科学家的热心支持下，科学出版社决定出版一套《博士丛书》。

我们指导思想是突出本丛书的学术性、创造性、新颖性、先进性和代表性，使之成为所有青年博士平等竞争的学术舞台和优秀科研成果的缩影。

这套丛书以专著为主，并适时组织编写介绍学科最新进展的综述性著作。它将覆盖自然科学各个领域，是一套充分体现我国青年学者科研成果和特色的丛书。

丛书编委会将在由著名科学家组成的专家委员会指导下开展编辑工作。本丛书得到了国家自然科学基金委员会和全国博士后管理协调委员会的特别资助。在此我们深表谢意。

《博士丛书》编委会
一九九三年十月

《博士丛书》专家委员会

王 元	王 仁	母国光	庄逢甘
庄 毅	刘西拉	沈克琦	汪培庄
李 未	肖纪美	谷超豪	张存浩
陈述彭	张光斗	郝柏林	赵忠贤
唐敖庆	郭慕孙	高景德	高为炳
谈德颜	阎隆飞	谢希德	路甬祥

《博士丛书》编委会

名誉主编	卢嘉锡	钱伟长		
副主编	白春礼	刘增良		
常务编委	王晋军	尤政	邬伦	林鹏
	屠鹏飞			
编委	王世光	王晋军	王颢安	尤政
	冯恩波	冯守华	白春礼	白硕
	刘增良	安超	乔利杰	邬伦
	许文	宋岩	张新生	汪屹华
	杨国平	林鹏	周文俊	屠鹏飞
	熊夏幸			

前 言

当前的自然科学正面临着深刻的变革。继牛顿力学和量子力学之后发展起来的非线性科学,正在改变人们对世界的看法,形成着一种新的自然观,促进一大类新兴学科的孕育和发展,并从根本上影响着现代科学的逻辑体系。

简单地说,非线性科学是近 30 年来在各门以非线性为特征的子学科研究基础上逐渐形成的,旨在揭示非线性系统的共同性质、基本特征和运动规律,是跨学科的一门综合性基础科学。分形理论是非线性科学中的一个活跃数学分支,其研究的对象是在非线性系统中产生的不光滑和不可微的几何形体,对应的定量参数是维数。分形理论的初创形式是分形几何学,据称它开创了 20 世纪数学的新阶段,是刻画混沌运动的直观的几何语言,是更接近现实世界的数学。由美籍法国科学家 B. B. Mandelbrot 在 70 年代中期所创立。但早在 1919 年 F. Hausdorff 就为此奠定了思想基础。现在所称的分形理论,则熔入了许多非线性科学的内容,吸收了相邻学科的最新成果,如重正化群技术和符号动力学等。

Mandelbrot 说,“分形是非线性变换下的不变性,但我首先研究的是在线性变换下不变的自相似性。”所谓自相似性,就是局部与整体的相似性。这一概念可追溯到古老的宗教典籍《华严经》、中医的《黄帝内经》和莱布尼兹的《单子论》以及东方哲学中的“靴袪假设”。从数学的观点看,分形是 Hausdorff 维数严格大于拓扑维数的集合,是具有伸缩对称性或膨胀对称性的几何对象。或者说,其组成部分以某种方式与整体相似的形体叫分形。分形概念的中

心内容是指不规则几何形体在动力学演化过程中,在一定的标度尺度范围内,其相应的测度不随尺度的改变而变化。分形可分多种类型,如简单分形、自仿射分形、胖分形、随机分形、确定性分形、复平面的分形及多重分形等等。

定量刻画分形特征参数是分形维数(简称分维)。它不是通常欧氏维数的简单扩充,而是赋予了许多崭新的内涵。分维可以是分数值,也可以是整数,并有多种定义和计算方法。常用的是 Hausdorff 维数、盒子维数、关联维数、信息维数、广义维数等等。

要准确地反映千姿百态的分形及其丰富多彩的特征,仅用单一的取决于整体特征的标度指数即分维是不够的,于是提出了多重分形(multifractals)即分形测度(也称多分形、复分形及多标度分形),它描述的是复杂分形在生长过程中不同层次的特征,每一个不同的层次用不同的参量来表示,这些不同的参量构成一个集合。这样的集合可理解为某个物理量。换言之,多重分形是定义在分形上的由多个标度指数的奇异测度所组成的集合,它刻画的是分形测度(或物理量)在支集上的分布状况,即用一个谱函数来描述分形不同层次的特征。奇异测度是指不存在密度函数的测度。这种从形体的部分(小尺度)出发而研究其最终整体(大尺度)特征的构想与热力学的思路是一致的。人们当前所致力于探讨的多重分形中的相变特征正是受到了这一类比的启发。分形上统计模型的相关普适性和普适性划分判据的研究,是当前国际非线性研究的重大前沿课题之一。

但是,多重分形谱仅能提供分形标度的统计信息,而不能完整地刻画分形的局域细微性质和动力学特征。最近发展起来的小波(wavelet)理论则是揭示分形局域标度性质的有力工具。可以说,分形概念的出现为人们认识事物的局部与整体的关系提供了一种辩证的思维方式;为描述自然界和社会的复杂现象提供了一种简洁有力的几何语言。而小波分析,则是在工具和方法上的重大突

破,已成功地应用于多重分形和信号处理的研究中。小波,物理学家也叫子波。直观地说,小波就是人们可以观察到的最短最简单的振动。从数学上说,小波是满足一定条件的函数(母小波)通过平移和伸缩得到的函数族。这一方法是从富立叶(Fourier, J. B. J)变换中发展起来的,其核心是多分辨分析。它不仅可以实现信号的时频局部化,而且与加窗富氏变换相比,具有局部化格式随频率高低变化的优点。通过小波变换,可以看到分形的丰富细节,为推测动力学根源提供了方法。

通常所说的分形,都指“瘦分形”,其本质特征是其勒贝格测度为零。近年在一些非线性动力系统中发现了另一类重要的奇异集合即胖分形,它是有分形边界且勒贝格测度不为零的集合。它的体积有限,维数为整数且与所在的欧氏空间维数相等。因此,维数不再是描述胖分形特征的敏感参数,而常用胖分形指数。自然界和科学实验中随时可见胖分形,例如在人体内和量子混沌系统中都存在胖分形,蛋白质也是一种胖分形等。

国际上分形研究方兴未艾。物理、化学、数学及生物学中的分形论文逐年增加。1991年英国培格曼出版社创办了《混沌、孤子和分形》的国际刊物,1993年初新加坡世界科学出版社推出了《分形学—关于大自然复杂几何的交叉科学杂志》。涉及分形的各种专题讨论会已近百次。“自然科学中的分形—大自然中复杂几何学的国际学术讨论会”将于1993年8月30日至9月2日在匈牙利布达佩斯召开。

在国内,分形研究起步较晚,但进展较快。1989年7月在成都市四川大学召开了“第一届全国分形理论及应用学术讨论会”,1991年11月在武汉华中理工大学召开了第二届会议,第三届会议将于1993年10月在合肥中国科学技术大学召开。拟定每二年召开一次。在我国的攀登计划《非线性科学》项目研究内容建议书中,列出了“分形的数学理论”和“分形的物理机制”两个大方向。

同时指出,“作为自然界自相似结构几何表现的分形以及自然界中自相似结构的生长问题是当前国际非线性研究的重大前沿课题,它的研究和应用引起了物理学、地球科学、化学、生物学、医学及材料科学等方面的广泛兴趣。”在1993年国家自然科学基金申请指南中,首次列出了“分形论及其应用”的研究内容。国内一些科学杂志,已开出了“分形分维”专栏。据统计,国内出版的分形理论及应用方面的书籍已近10部,部分成果已达国际先进水平。但是,尚未见用分形理论研究分子科学及相关问题的专著。分形概念及方法在分子科学中的应用,是近年国际学术界的一个新动向,但深入的漂亮的工作还不多见。本书收集了我们近年的一些研究成果,其中部分工作已获1992年度国家教委科技进步一等奖(甲类)。

为使本书具有由浅入深,循序渐进的特点,首先简要地介绍了分形分维的基本概念及混沌系统的一些特性,讨论了分形内插与样条函数,小波分析以及时间序列等。然后,重点介绍了蛋白质及酶分子链、表面的分形研究,酶分形动力学及酶模型的分形设计,以及用分形方法研究高分子和胶束的一些初步结果。

我们撰写本书的目的是想为从事分形理论应用的科技工作者、大学生、研究生及有关哲学社会科学工作者,提供一本实用分形学的读物。因此,我们既注意定性与定量的结合,又尽量指出一些新发展及方向。舍去了许多纯分形数学的内容。各章有一定的独立性,读者可根据兴趣和需要有选择地参阅。若需作进一步的追踪和深入探讨,可查阅书末所附的参考文献。

作者

一九九三年二月于成都望江楼

国家自然科学基金委员会资助

中国博士后科学基金会资助

目 录

第一章 分形系统	1
一、分形与无标度性	3
二、分形与复杂系统	4
三、分形维数	6
四、迭代函数系统与自相似集	15
五、谱维数	23
六、质量分形、表面分形、孔隙分形与分形子集	28
七、自仿射系统	33
八、多重分形测度	41
九、胖分形	49
第二章 混沌系统	53
一、混沌的产生及其例子	53
二、李雅普洛夫指数	65
三、不变测度与相关函数	70
四、奇怪吸引子	74
五、柯尔莫哥洛夫熵与关联维数	80
第三章 分形内插与样条函数	84
一、线性分形内插	84
二、B 样条函数	89
三、均匀 B 样条上的分形内插	92
四、非均匀 B 样条上的分形内插	96
第四章 分形与小波	101
一、小波概论	101
二、小波函数的正则性、Hölder 指数与分形	114
三、滤波迭代过程产生的分形	130

四、分形生长的标度性质与小波变换理论	133
五、某些动力系统不变测度的小波变换	139
六、自相似和多重分形雪花模型的小波变换	146
七、DLA 与电沉积集团的小波变换	150
第五章 时间序列与分形	157
一、随机线性模型	157
二、一维随机行走及其标度性质	162
三、分数 Brown 运动	164
四、Hurst 指数的计算方法	168
五、分数 Brown 曲面	172
六、分形模型与随机模型的联系与比较	174
第六章 分形与混沌特征量的计算方法	179
一、无标度区的计算方法	179
二、分形曲线的维数计算	184
三、平面分形图的分维计算	186
四、分形曲面的分维计算	189
五、时间序列的分维计算	190
六、多重分形谱的计算	195
七、重正化群方法	198
八、柯尔莫哥洛夫熵的计算	200
九、李雅普洛夫指数的计算	201
第七章 酶和蛋白质分子链的分形与混沌	207
一、酶和蛋白质的分形	207
二、分形维数与三级结构的关系	208
三、计算蛋白质分维的简便方法	216
四、分子链的构象熵与分维	217
五、蛋白质的谱维数	219
六、蛋白质结构参数的混沌理论分析	223
第八章 酶和蛋白质表面的分形特征	228
一、胖分形标度指数	228

二、变分法计算表面分维·····	231
三、酶表面的多重分形·····	235
四、多重分形表面上的反应·····	237
五、Goetze-Brickmann 理论·····	242
第九章 酶分形动力学 ·····	253
一、分形化学动力学·····	253
二、酶变构效应的分形机制·····	255
三、Michaelis-Menten 方程的分形修正·····	263
第十章 酶模型的分形设计 ·····	269
一、仿酶的分形原理·····	270
二、酶模型的分维·····	273
三、苯型物和树枝物·····	278
第十一章 高分子及胶束的分形研究 ·····	300
一、高分子的分形·····	301
二、稀溶液的性质·····	303
三、半稀溶液理论·····	306
四、凝胶的分形网络·····	309
五、胶束的分形特征·····	312
参考文献 ·····	320
后记 ·····	331

第一章 分形系统

吉布斯(J. W. Gibbs)和魏格纳(E. Wigner)曾说,数学是一种语言,这种语言在自然科学中展示出了自身难以预料的效果,以欧氏几何和黎曼几何为背景建立起来的传统数学,在规则、光滑形状(或有序系统)的研究中,正展示了这样的效果。

然而,对于自然界和科学实验中出现的那些凹凸而不圆润、破碎而不连续、粗糙而不光滑的形(或无序系统),传统的几何语言却无能为力,甚至是错误的抽象。应运而生的一种新的数学语言—分形几何(fractal geometry)弥补了传统几何之不足,这一语言是美籍法国数学家曼德尔布罗特(B. B. Mandelbrot)在 1975 年提出的。80 年代,它便迅速成为科学家讨论和运用最热烈的语言。这种语言适合于数学、自然界和科学实验中那些形形色色的实体,这些并非规则和光滑,而是斑痕、麻点、破碎、扭曲、缠绕、纠结、折迭的实体。

这些实体没有规则、光滑图形(如圆、球面、锥面)的形式美,却有着无穷嵌套的结构和韵律美;没有规则图形的那种匀齐性和对称性,但在尺度变换上却表现出对称性。在从大到小的多种尺度上有相同的粗糙度和破碎度。这就是说,这些形体除了本身的大小外,不存在能表示其内部构造的特征尺度。没有特征尺度,就必须考虑从大到小的各种尺度,这正是用传统几何语言描述它们的困难所在。因此,它们在传统数学面前,就意味着复杂,意味着不规则。

但是,在不同尺度上表现出相同程度的粗糙性和破碎性意味着标度变换下的不变性。这种不变性就是无标度性。无标度性正是解决这些问题的关键所在。在无标度性下,这些不规则的实体意味着规则,复杂性意味着简单。

所谓无标度性,就是自相似性,即局部与整体在形状,结构或功能等方面是自相似的。这种自相似性广泛存在于自然界和科学实验中,如海岸线与地形地貌、河流与水系、云彩的边界、降雨区的边界、宇宙中星系与星团的分布。流体的湍流,地下水和石油的渗流,动物的花纹,植物的叶形、果型的数目,相变点附近的涨落花斑,无线电传输噪声,高分子凝胶,乃至股票市场价格的波动等等。

这种新的分形几何语言,可以从不同的角度,按不同的方式来欣赏和应用。在外行眼里,它象变幻莫测的魔术;在艺术家眼里,它们富有诗情画意。艺术家们曾在传统的欧氏几何中发现理想的美,而分形几何却为艺术增添了新的光彩,产生了新的艺术形式。运用分形几何,已制作出了山、云彩、树、植物、行星,以及由它们组合成的风景画。那些正在寻求对自然现象进行控制的工程师们,当他们必须描述这些现象时,分形语言既方便又好用。那些优秀的物理学家和其他科学家们使用分形语言,做出了许多非常漂亮的工作,使人类增进了对世界的认识和理解。

数学家的工作也许是单调乏味的了,但是很多早期的分形图象都来自于纯数学领域,递归和迭代产生了多少迷人的分形图象。如朱丽亚(Julia)集、法图(Fatou)集、曼德尔布罗特集、混沌动力系统的分形吸引子等等。这些分形图象使得科学家和艺术家流连忘返。分形几何目前仍是一个十分活跃的领域,一些数学家正通过迭代寻找新的分形图象。另一些数学家则就个别问题或一般理论提出猜想并力图证明这些猜想,例如对曼德尔布罗特集就有很多猜想。尽管这些猜想叙述起来非常简单,然而要证明它们却是困难重重。但是数学家们凭着对数学的固有兴趣,激情丝毫不减。

如今,科学已为分形语言找到了广泛的用途,分形模型已用于各种自然现象的描述。

本章将介绍分形的概念、背景与术语;讨论几种常用的分形维数和几类分形集:如自相似集、自仿射集、多重分形侧度和胖分形等。

一、分形与无标度性

自1982年曼德尔布罗特出版《自然界的分形几何学》一书以来,分形这个概念已在全世界不胫而走,它不仅是科学家们讨论最兴奋最热烈的概念,而且逐渐传播到外行公众之中。

Mandelbrot, Taylor 等都曾对分形作过尝试性定义, Falconer 从数学的角度对分形进行过更详细的描述,但至今仍无一个为人们所普遍接受的定义。为应用方便,我们给出 Mandelbrot 在1986年的描述:

分形是指由各个部分组成的形态,每个部分以某种方式与整体相似。

对这一描述加以引伸,它包括以下含义:

1)分形既可以是几何图形,也可以是由“功能”或“信息”架起的数理模型;

2)分形可以同时具有形态、功能和信息三方面的自相似性,也可以只有其中某一方面的自相似性;

3)自相似性可以是严格的,也可以是统计意义上的相似,自然界的大多数分形都是统计自相似的;

4)相似性有层次结构上的差异。数学中的分形,具有无限嵌套的层次结构,而自然界中的分形只有有限层次的嵌套,且要进入到一定的层次结构以后才有分形的规律(通常是幂律);

5)相似性有级别(即使用生成元的次数或放大倍数)上的差异。级别最高的是整体,最低的称为0级生成元。级别愈接近,则愈相似。级别相差愈大,相似性愈差,可用无标度区间或标度不变