

申维 编著

耗散结构、自组织、突变理论与地球科学

HAOSANJIEGOU ZIZUZHI TUBIANLILUN YU DIQIU KEXUE

地质出版社

地质过程与矿产资源国家重点实验室 资助成果
国 家 自 然 科 学 基 金

耗散结构、自组织、突变 理论与地球科学

申 维 编著

地 质 出 版 社

· 北 京 ·

内 容 提 要

本书简述了耗散结构、自组织和突变理论的基本概念和方法;讨论了地球科学现象中的耗散结构、自组织和突变表现、性质以及应用情况。

本书可供从事数学地质、矿产勘查、矿床地质和地球化学等方面的研究人员、工程技术人员以及高等院校有关专业的教师和高年级学生以及研究生阅读参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

耗散结构、自组织、突变理论与地球科学/申维编著.
北京:地质出版社,2008.4
ISBN 978-7-116-05661-9

I. 耗... II. 申... III. ①地球科学-耗散结论理论②地球科学-自组织理论③地球科学-突变理论 IV. P

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 039259 号

责任编辑:孙亚芸

责任校对:郑淑艳

出版发行:地质出版社

社址邮编:北京海淀区学院路 31 号,100083

电 话:(010) 82324508 (邮购部);(010) 82324569 (编辑室)

网 址:<http://www.gph.com.cn>

电子邮箱:zbs@gph.com.cn

传 真:(010) 82310759

印 刷:北京地大彩印厂

开 本:787 mm × 1092 mm $\frac{1}{16}$

印 张:8

字 数:195 千字

印 数:1—600 册

版 次:2008 年 4 月北京第 1 版·第 1 次印刷

定 价:32.00 元

书 号:ISBN 978-7-116-05661-9

(如对本书有建议或意见,敬请致电本社;如本书有印装问题,本社负责调换)

前言

非线性科学是正在蓬勃发展中的前沿科学。在自然现象和社会现象中，处处存在着相互作用，因而处处出现非线性的问题。用非线性的模型来研究客观世界是科学发展的必然，同时也是一种严峻的挑战。非线性的问题，在数学上远远比线性问题复杂。研究非线性问题，需要很高的洞察力和创造力、很强的数学才能和操纵计算机的技巧，需要有广博的科学知识和对某一门具体科学的深入掌握。可以说，现在还只能算是非线性科学的初创阶段，对它的研究需要长期的奋斗，既会遇到山重水复的迷宫，也会有柳暗花明的境界。

复杂性是非线性理论共同研究的最基本内容，然而地学中的疑难问题无一不与复杂性有关，如生态系统的受损、自然地质灾害的频发以及环境污染等与人类生存息息相关的问题都是如此。地球系统是一个复杂的巨系统，非平衡性、非线性、多尺度性、突变性、自组织性、自相似性、有序性和随机性等是地球系统最本质的属性，而这些特性恰是非线性理论关注的焦点。因此，地球科学是一个丰富多彩的非线性世界，非线性理论是打开地学这座“迷宫”的金钥匙。

耗散结构理论、突变理论、自组织理论、混沌动力学和分形理论几乎都是创立于 20 世纪 70 年代，它们无一不是跨学科的，也无一不是非线性的，它们共同的目标是探索大自然中的复杂性，从不同的角度揭示出复杂现象中的规律性。短短几十年，这些非线性理论取得了令人瞩目的成就，可以说，这些非线性理论在 20 世纪是继量子力学和相对论两项重大科学发现的第三次科学革命。我们把这些非线性理论共同形成的学科称为非线性科学。

耗散结构理论揭示了系统在一定的外界条件下其内部的演化机理，具有重要的方法论意义。在自然科学的各个领域，宇宙之深邃，粒子之幽微，生命之奇奥，均可用耗散结构理论给予解释。耗散结构理论使用的许多概念，如开放、负熵流、非平衡、非线性、突变、分叉、涨落等等，已引入自然与社会科学在许多领域，如生物生态、地质科学、地球物理和社会科学等领域，成为人们研究探讨自然与社会问题的有力武器。耗散结构理论对系统研究得出的关于系统非平衡、开放与有序、非线性作用等结论对非线性系统理论的贡献是卓越的。在研究复杂系统时，首先要找到描述系统演化的变量。一个复杂系统的演化过程能否用耗散结构理论来研究，很重要的一点是看我们能否找出一组能定量描述系统演化的变量。随着我们对自然现象认识的深入，找到的各种变量越多，我们就越有可能在自然科学诸领域中运用耗散结构理论来讨论问题。

自组织是依靠系统内部的动力，自发产生某种空间上、时间上或功能上的有序结构。自组织也就是指在没有外界干扰时，体系从无空间（时间）、花样（无序）到有空间花样

(有序) 状态转变的一种自治过程。自组织现象的形成必须具备自反馈机制以及非平衡、非理想和非线性条件。可以认为自组织是远离平衡时, 体系从所有涨落产生的有序化模式中选择一种, 并使其放大增强成为一种宏观可辨的有序现象的能力, 而自反馈是增强、放大涨落和引起定态失稳并形成稳定的宏观有序结构的关键环节。

突变理论是以拓扑学、奇点理论为主要数学工具, 对不连续现象(自然的和社会的)做定性研究的一个新兴数学分支。它是由法国数学家考雷内·汤姆(R. Thom)教授于1972年创立的。一般所讲的突变理论实际上是初等突变理论, 它的主要数学渊源是根据势函数把临界点分类, 进而研究各种临界点附近非连续性态的特征, 即为有限个数的若干个初等突变。把这样得到的知识与对不连续现象的理论分析和观察资料相结合, 就可以建立数学模型, 更深刻地认识不连续现象的机理并作预测。

作者在博士研究生学习和博士后(第一期和第二期)工作期间, 得到了导师赵鹏大院士、王世称教授和李朝阳研究员的悉心指导和热心帮助, 开展了非线性理论及其在地学中的应用研究工作, 承担了多项国家自然科学基金项目(批准号 49472165, 49873027, 40172099, 40672196, 40638041)、中国博士后科学基金项目《非线性地质学研究及其应用》、国土资源部科技项目《矿产预测中的非线性新模型研究》(批准号 B7-10)、国家重点基础研究发展计划项目(批准号 2006CB701400)和资源环境管理实验室开放基金项目(编号 REM06012)等, 发表了一系列关于非线性理论及其在地学中应用研究的论文。在上述研究成果基础上, 编写并出版了《分形混沌与矿产预测》一书(地质出版社, 2002年), 而现在的《耗散结构、自组织、突变理论与地球科学》一书是其姊妹篇。目前, 国内外已有一些关于非线性科学的著作, 但绝大多数是理论上的探讨, 在地学领域里的应用较少, 本书有多半以上的篇幅致力于应用方面。

本书引用了国内外一些学者的研究成果和观点(限于篇幅, 参考文献中只列出了其中一部分), 对他们表示感谢。

感谢地质出版社的各位编辑, 他们在编辑过程中付出了艰苦的劳动。

本书的出版得到了国家重点基础研究发展计划项目(批准号 2006CB701400)、中国地质大学(北京)《成矿系统演化对深部过程与浅表环境的响应》创新团队建设项目、高等学校学科创新引智计划资助(编号 B07011)和资源环境管理实验室开放基金项目(编号 REM06012)的支持与资助, 作者对此表示衷心的感谢。

由于水平有限, 书中不妥和有错误之处在所难免, 敬请专家和读者不吝指正。

作者

2007. 12

目 次

前 言

第 1 章 耗散结构理论	1
1. 1 耗散结构理论简述	1
1. 2 耗散结构理论的热力学基础	2
1. 3 与耗散结构理论相关的若干概念	5
1. 4 耗散结构的两个假设	6
1. 5 耗散结构的分支与突变	7
1. 6 耗散结构形成的条件、特点和混沌状态	8
1. 7 耗散结构系统的负熵及其实现过程	9
1. 8 耗散结构理论的科学价值	12
第 2 章 耗散结构理论在地球科学中的若干应用	14
2. 1 地球物质系统	14
2. 2 地质学	18
2. 3 地球化学	22
2. 4 成矿作用和成矿过程	23
2. 5 油气聚集	28
2. 6 地震	29
2. 7 断层和断裂演化系统	30
2. 8 喀斯特地域	32
2. 9 地理系统	36
2. 10 湿地生态恢复	39
2. 11 泥石流	40
2. 12 沙漠化	42
2. 13 土地系统	43
2. 14 井灌水源	45
2. 15 河型转化	47
2. 16 地表进化	48
2. 17 小流域侵蚀地貌过程	48
2. 18 地下水系统	49
2. 19 白垩纪若干重大地质事件	51
2. 20 生态系统	54

第3章 自组织理论简介	56
3.1 自组织理论简述	56
3.2 自组织系统行为模式的特征	61
3.3 自组织理论的役使原则	62
3.4 自组织临界态理论的基本原理	63
第4章 自组织理论在地球科学中的若干应用	67
4.1 地球物质系统	67
4.2 地球化学	67
4.3 岩石矿物学	69
4.4 成矿作用	75
4.5 岩石圈板块	77
4.6 地震	78
4.7 断层演化系统	80
4.8 地理系统演化	81
4.9 泥石流	83
4.10 地下水系统	85
4.11 河流形态演变系统	87
4.12 坡面土壤细沟侵蚀过程	88
第5章 突变理论	90
5.1 突变理论简介	90
5.2 突变的类型与尖点突变模型	93
第6章 突变理论在地球科学中的若干应用	97
6.1 地震	98
6.2 地球表层	100
6.3 工程地质	101
6.4 地层沉陷	104
6.5 泥石流	105
6.6 地下水系统	108
6.7 水土流失	112
6.8 油气检测	114
参考文献	117

CONTENTS

Preface

Chapter 1 Dissipative structure theory	1
1. 1 Brief dissipative structure theory	1
1. 2 Thermodynamics foundation of dissipative structure theory	2
1. 3 Some conception in dissipative structure theory	5
1. 4 Two hypotheses for dissipative structure	6
1. 5 Furcation and breaking of dissipative structure	7
1. 6 Conditions, characteristics and chaos states of the formation of dissipative structure	8
1. 7 Negentropy of dissipative structure system and its realizing process	9
1. 8 Scientific value of dissipative structure theory	12
Chapter 2 Some applications of dissipative structure theory in geosciences	14
2. 1 Earth substance system	14
2. 2 Geology	18
2. 3 Geochemistry	22
2. 4 Ore – forming processes	23
2. 5 Hydrocarbon migration and accumulation	28
2. 6 Earthquake	29
2. 7 Evolvment system in faults	30
2. 8 Karst region	32
2. 9 Geography system	36
2. 10 Wetland ecological restoration	39
2. 11 Debris flows	40
2. 12 Desertification	42
2. 13 Land system	43
2. 14 Irrigated well sources	45
2. 15 Change of river patterns	47
2. 16 Earth surface evolution	48
2. 17 Geomorphological processes of a small watershed	48
2. 18 Groundwater system	49
2. 19 Several cretaceous major geological events	51

2. 20 Ecosystem	54
Chapter 3 Self-organization theory	56
3. 1 Brief self-organization theory	56
3. 2 Characteristics of action modes of self-organization system	61
3. 3 Slaving principle of self-organization theory	62
3. 4 Foundation of self-organized criticality theory	63
Chapter 4 Some applications of self-organization theory in geosciences	67
4. 1 Earth substance system	67
4. 2 Geochemistry	67
4. 3 Petrology and mineralogy	69
4. 4 Ore-forming processes	75
4. 5 Lithosphere plates	77
4. 6 Earthquake	78
4. 7 Evolvment system in faults	80
4. 8 Geography system	81
4. 9 Debris flows	83
4. 10 Groundwater system	85
4. 11 Formation and evolution system of river structure	87
4. 12 Process of soil and rill erosion on slope	88
Chapter 5 Catastrophe theory	90
5. 1 Brief catastrophe theory	90
5. 2 Catastrophe types and cusp catastrophe models	93
Chapter 6 Some applications of catastrophe theory in geosciences	97
6. 1 Earthquake	98
6. 2 Earth surface layer	100
6. 3 Engineering geology	101
6. 4 Stratum sinking	104
6. 5 Debris flows	105
6. 6 Groundwater system	108
6. 7 Soil erosion	112
6. 8 Hydrocarbon detection	114
References	117

第1章 耗散结构理论

1.1 耗散结构理论简述

比利时物理化学家伊里亚·普里高津 (Ilya Prigogine) 教授于 20 世纪 60 年代末创立了耗散结构 (Dissipative Structure) 理论。由于对非平衡热力学尤其是建立耗散结构理论方面的贡献, 他荣获了 1977 年诺贝尔奖。耗散结构理论于 1969 年由普里高津在一次“理论物理学和生物学”的国际会议上正式提出。1971 年, 普里高津等人写成著作《结构、稳定和涨落的热力学理论》, 比较详细地阐明了耗散结构的热力学理论。1971~1977 年耗散结构理论的研究有了进一步的发展, 包括用非线性数学对分岔的讨论, 从随机过程的角度说明涨落和耗散结构的联系。1977 年普里高津等人所著《非平衡系统中的自组织》一书就是这些成果的总结。之后, 耗散结构理论研究又有了新的发展, 主要是用非平衡统计方法, 考察耗散结构形成的过程和机制, 讨论非线性系统的特性和规律, 以及耗散结构理论在社会经济系统等方面的应用。这一理论极大地开阔了人类的视野, 极大地丰富了人类的科学和哲学思想, 提供了新的科学研究途径和方法, 从而成为进一步认识和改造世界的指南和动力。

何谓耗散结构? 可从 4 个方面来理解: ①它是一种自然现象, 广泛存在于自然界和人类社会, 如物理学中的激光、化学中的自催化反应以及人体、生物、城市、社会等等; ②它是一种稳定的时空有序结构, 由原来的无序结构, 靠外界不断供应能量或物质, 通过量变引起质的突变而形成; ③它是相对于平衡结构而言的, 平衡结构是指系统在平衡状态下的稳定有序结构, 是一种静结构, 具有可逆性, 耗散结构是指系统在耗散状态下的稳定有序结构, 是一种动结构, 具有不可逆性; ④它出现在开放系统的远离平衡态。一个开放系统具有热力学平衡态、近平衡态、远离平衡态三种存在方式。

耗散结构理论主要研究远离平衡的开放系统, 不论它是力学的、物理化学的、生物学的还是软科学的系统, 只要该系统之环境不断与其交换物质或能量 (实质上是交换负熵) 并且达到一定程度 (超过某一临界点), 那么原来较为混乱无序的状态会在几乎同一时间内突变地过渡到有组织的状态。这是一种在时间上、空间上或功能上都是有序的状态, 由于这种序结构均以消耗来自环境的“负熵”为其主要特征, 因而统称为“耗散结构”。虽然在不同领域定义了不同的熵, 因而耗散结构具备了不同的形式或不同的物质外壳, 但这类结构在形成、演变以及失稳等方面有许多共同规律, 而研究这些耗散结构的一般规律的科学即构成了新的横向学科——耗散结构理论。

耗散结构理论用以研究系统在远离平衡的条件下, 由于其内部的非线性相互作用, 发生从无序热力学分支向耗散结构分支转化, 形成一种稳定的有序结构。该理论强调当一个系统接近平衡时原有的结构就会趋于消亡, 只有当系统远离平衡时才能产生新的有序结

构。一个远离平衡的开放物理化学系统（力学的、物理的、化学的、生物的等）具有发生自组织过程的能力。这样的一种系统通过不断地与外界交换物质和能量，就有可能从原有的混乱无序状态，转变成为一种在时间上、空间上或功能上的有序状态。耗散结构定义为：在远离平衡的条件下，当外界条件达到某一阈值时，量变可能引起质变，系统通过不断地与外界交换能量和物质，会自动出现一种自组织现象，组成系统的各子系统会产生一种互相协调的作用，借助于外界的能流和物质流而维持一种空间或时间的有序结构。这种结构是由于进行不可逆过程时系统发生能量耗散所致，地质地球化学过程，如构造活动、岩浆侵入、成矿作用或矿化富集等，均为不可逆过程，耗散结构可给予这些过程新的分析理论和研究方法。

从大量客观事实看，在自然界、科学实验与社会经济现象中，可以区分出两类稳定化的宏观有序系统结构，即平衡状态下稳定化的有序结构（平衡结构）和耗散状态下稳定化的有序结构（耗散结构）。平衡结构的平衡是从热力学角度讲的，如在与外界没有物质交换的条件下，宏观系统的各部分在长时间内不发生任何变化，例如晶体和液体这样一种稳定化的有序结构，是较典型的平衡态下的稳定化结构。耗散结构是指当系统处于非平衡状态时，通过与外界进行能量和物质交换而形成且维持的一种稳定化的宏观系统结构，即在非平衡态下宏观系统的自组织现象，例如地质现象中伟晶岩的分带；矿床、元素分带；化学反应（化学振荡）中的有序结构；生物呈现的有序性以及社会现象中的有序性等，都可视为非平衡状态下耗散结构的例子。总之，平衡结构是“死”的、静态的有序结构，而耗散结构是“活”的、动态的有序结构。

1.2 耗散结构理论的热力学基础

热力学的研究对象是以大量微观粒子组成的客观系统，大量粒子的集合称为热力学系统。在研究热力学系统的运动规律时，既要研究构成系统的各种因素，同时也要考虑系统外部的环境对系统的影响和作用。系统外部环境称为系统的外界。根据系统与外界的相互关系可把系统分为孤立系统和开放系统。孤立系统是不受外界影响的系统，与外界没有质量和能量交换。当然从哲学上讲，现实世界中绝对意义的孤立系统是不存在的，但在一定时间、空间范围内，当系统所受外界作用对所研究问题的影响可以忽略时，在这一相对意义上可以认为是孤立系统。孤立系统不受外界影响，系统内发生的过程是自发的。开放系统是与外界有能量交换与物质交换的系统。由于受外界影响，开放系统发生的过程与孤立系统从根本上不同。系统的开放性，对于系统由低级到高级的自组织、进化及新功能产生起着决定性作用。热力学系统除气体系统、液体系统外，还包括物理系统（诸如电磁介质系统、热辐射系统等物理系统）、溶液及化学系统。根据耗散结构理论，热力学系统可以推广到生物系统、生态系统、经济系统以及其他自然和社会系统。

（1）耗散结构理论基础

耗散结构理论是在经典热力学基础上发展起来的。按照经典热力学的观点，物质系统的演化总是趋于平衡，物质结构为平衡结构。波尔兹曼（Boltzmann）的热力学第二定律指出，对于孤立系统，系统的演化趋向于使系统的熵极大，即系统的混乱度极大，系统趋

向于无序结构，该定律也说明熵增加原理是在有限的空间和时间条件下得到的。“熵”这个术语是用来表示能量在空间分布上的均匀程度，或者说是用来表示一个系统的混乱无序或有序程度的，系统的能量分布越均匀，系统越混乱无序，说明系统的熵越大，反之亦然。

对于封闭系统，引进了吉氏自由能 G ： $G = H - TS$ ，其中， H 表示系统的能量， T 表示系统与外界同一的绝对温度， S 表示熵。

由于封闭系统（有能量交换但没有物质交换）必须把环境的熵变考虑进去，因此系统演化由原生的孤立系统熵增加原理，变成为此时的自由能下降原理。低温时，方程右边第二项可忽略。自由能的下降主要有赖于能量下降。达到平衡时，自由能减至最小。此后不再减小，这时，通常熵也较小。随着温度的不断提高，系统转化为熵越来越高的结构，这就是波尔兹曼平衡结构的原理，也称为“平衡热力学”。

(2) 用熵变方程解释耗散结构理论

耗散结构理论是用熵变方程来解释的，即开放系统的总熵变（Entropy Transition）为： $dS = diS + deS$ ；其中 diS 表示由系统内部的不可逆过程引起的熵变，叫熵产生（Entropy Production）， diS 不可能为负（熵增加原理）； deS 表示系统与外界环境进行物质交换时引入的熵变，叫熵流（Entropy Flux）或熵交换，可正可负，大于零为“正熵流”，小于零为“负熵流”，等于零称为“零熵”。

一个与外界环境之间有熵交换的开放系统的进化与否，主要取决于系统的熵 diS 与 deS 的代数和。然而在不同的系统中熵流 deS 有不同情况：

- 1) 在孤立系统中，没有熵流， $deS = 0$ ，系统的 $dS > 0$ ，总是熵增加，无序度增大。
- 2) 在热力学平衡态的开放系统中， $deS > 0$ ， dS 增大，加速了系统向平衡态的运动。
- 3) 在线性非平衡态的开放系统中， $deS \approx 0$ ，系统开始向有序结构发展，但终究抵抗不了系统熵 diS 的破坏，最终趋于平衡。
- 4) 在远离平衡态的非线性作用机制的开放系统中， $deS \ll 0$ ， dS 逐渐变小，系统的有序化程度增加，所以系统是进化的。

从熵变方程的讨论中可以看出，一个开放系统要从无序态走向有序进化态，必须是 $deS \ll 0$ ，而且这个负熵流还必须抵消系统内熵增加（ $diS > 0$ ）之后，使系统的总熵减少，从而使系统走向具有生机活力的耗散结构。由于这个条件的原因，所以把耗散结构理论又称为“负熵流理论”。

(3) 系统的有序与无序

非平衡热力学的研究成果指出，平衡态是无序的，而非平衡才可能是有序的。现在我们来考察与上述（1）不同的另一类现象。首先是热扩散现象，两种气体的混合物置于冷热两壁之间，在热梯度作用下，一种气体分子在热壁上聚集。当达到定态时，由于温度梯度的存在，系统显然是非平衡的，但熵通常小于系统均匀时的熵，系统成为有序。其次考虑贝纳特（Benard）现象（图 1.1）。在一装满水的器皿底部加热，产生一种热梯度。开始时器皿底部的热量通过热传导的方式向上传递，但当继续在器皿底部加热，使器皿内的温度超过某一临界值时，产生了对流元细胞，形成一种有序结构。这两种现象表明，系统的非平衡也可导致有序结构。

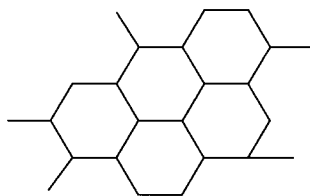


图 1.1 Benard 对流的结构

从熵的角度进一步考虑上述现象。对于封闭系统，系统的熵变化包括两部分，一部分为系统内部的熵产生 diS ，另一部分则是通过系统边界由外部流入的熵流 deS ，于是有 $dS = diS + deS$ 。根据热力学第二定律 $diS > 0$ ，在演化过程中欲使总熵减小而达到有序结构，只能使熵向外流。再来考虑贝纳特现象，当温度梯度增大导致对流元细胞产生后，能量迅速向外耗散，系统熵下降，形成有序结构，即系统在非平衡状态（往往是远离平衡态）下形成时间和空间上的有序结构。

开放系统和孤立系统的本质区别在于前者存在熵交换项 deS 。在 $deS < 0$ 且这个负熵流足够强的情况下，它除了抵消系统内部的熵产生项 diS 之外，可以使系统总熵变 $dS = deS + diS < 0$ ，从而使终态可能比始态更有序。普里高津等人不仅把一个非平衡开放系统的熵变 dS 分解为熵交换项 deS 和熵产生项 diS ，更重要的是建立了熵交换与物质流、能流及熵产生与系统内各种不可逆过程的明确关系。

普利高津指出，当开放系统与环境之间发生持续的能量和质量交换时，系统将有可能从近平衡态被推移远离平衡态，并且由于不可逆过程所导致的系统能量的耗散，可以使之发生“自组织”，并产生时间和空间上有序的“耗散结构”。例如断裂，不论是张性断裂还是压性断裂，由于与外界都有压差、温差及所含溶液的浓度差等，因此均属于一种非平衡态的开放系统，这种系统趋于减小，从无序向有序转变，即通过压力蠕动、温热扩散和溶液弥散等地球化学作用形成耗散结构。

(4) 耗散结构是非平衡结构

耗散结构是一种非平衡结构，不能用经典热力学加以研究。作为经典热力学最基本公式的 Gibbs 公式，是建立在平衡演化的基础上的。虽然对于非平衡演变的熵改变量，只有终态和始态是平衡态，Gibbs 公式仍能适用，但不能用观察到的量来表示熵，这种不确定性使得热力学第二定律限于研究平衡，即热力学演化的终态。然而，在许多自然过程中，由于许多边界条件的限制，系统根本不可能达到平衡态。例如，用一根铁杆，一端连接恒定的高温热源，另一端连接恒定的低温热源。当经过一段时间的热传导后，铁杆内各点的温度不再随时间而变，但由于铁杆两端高、低温热源是恒定的，此时铁杆内各点的温度互不相同，温度梯度依然存在，仍有热量从热源持续传向冷源，系统显然未达到平衡。这种系统参量不随时间 t 变化，但随空间坐标 x 变化的情形称为热力学定态，表达为： $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ ，

$\frac{\partial f}{\partial x} \neq 0$ ，其中 f 为所考虑的状态参量，而平衡时则是： $\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial x} = 0$ 。达到定态以前的演化态

或瞬间态为： $\frac{\partial f}{\partial t} \neq 0$ ， $\frac{\partial f}{\partial x} \neq 0$ 。

这种由于边界条件使系统演化不能达到平衡态而只能达到热力学定态的现象是很普

遍的。地质上岩浆热对围岩的热量可以看成是这样的例子。对于这种非平衡系统中形成的耗散结构，经典热力学显得无能为力，对它的研究必须建立在非平衡热力学的基础上。

1.3 与耗散结构理论相关的若干概念

(1) 对称性、有序和无序

各种事物都具有某种对称性。对称性指事物的某种属性经过一定的变换仍保持不变的性质。事物之间或事物内部各要素间的关系具有一定的次序，称为序。系统的对称性越高，有序度就越低。而“有序”则意味着对称性的减弱，称为对称性破缺。

(2) 熵与不可逆性

热力学有一个重要的物理概念——熵（熵的物理量为 $S = k \ln W$ ， k 为波尔兹曼常数， W 为热力学几率）。处于非平衡态的孤立系统，一定自发地朝熵增大的方向发展，直到具有最大熵的平衡态，孤立系统的发展方向是熵增大的箭头。

热力学第二定律揭示了孤立系统趋向平衡态的过程是不可逆过程，它会自发地从非平衡态发展到物理性质均匀的平衡态，反过来它绝不可能自发地从平衡态返回非平衡态。

(3) 昂萨格倒易关系

把热流、物质扩散流等各种不可逆流的强度表示为 y_i ($i = 1, 2, \dots, n$)，把温度梯度、密度梯度等不可逆力表示为 x_j ($j = 1, 2, \dots, m$)。 y_i 是 x_j 的函数，向量形式表示为 $Y = F(X)$ ，一般 F 比较复杂。在不可逆力或流不太强的情况下，可以认为是线性关系：

$$y_i \rightarrow l_{ij} x_j$$

l_{ij} 是不依赖于 x_j 的常数，因此 $y_i = \sum_j l_{ij} x_j$ ， l_{ij} 称为线性唯象系数。

1931 年昂萨格发现，线性系数满足 $l_{ij} = l_{ji}$ ，即在 $Y = \underset{n \times m}{L} \underset{n \times m}{X}$ 中， L 是对称矩阵。这一关系称为昂萨格倒易关系。

在昂萨格倒易关系的基础上，普利高津进一步推导出近平衡区的最小熵产生原理。一个孤立系统必然朝着熵增加的方向演化，直至达到平衡态，熵的值最大，熵产生率变为零。当外界约束使系统不可能达到平衡态时，系统内总会有正的熵产生率，这时熵产生率会随时间不断减少，直至达到非平衡态，熵产生率取得极小值。普利高津经过多年的研究，发现系统在远离平衡的非线性区，昂萨格倒易关系不再成立，熵产生率会因不同情况随时间振荡变化。

(4) 近平衡态和远离平衡态

一个开放系统依据距离平衡态的远近程度，可能以三种不同的宏观状态存在：平衡态、近平衡态和远离平衡态。但受外界约束条件的限制，这三种状态未必都能实现。近平衡态和远离平衡态都属于非平衡态。在非平衡态下，系统做功，并产生熵。在平衡态下，系统不再做功，因而熵产生也就停止了。处于非平衡态的系统有许多变化着的因素影响其演变方向。但归纳起来，不外乎两大类：一类是广义流；另一类是广义力。这两者之间的关系一般是很复杂的函数关系。但在近平衡态，广义流与广义力的关系是线性关系，故近

平衡态亦称为线性非平衡态。而在远离平衡态，他们之间的关系是复杂的非线性关系，故亦称为非线性非平衡态。在近平衡态，判断系统稳定性的李雅普诺夫函数是熵产生，最小熵产生原理保证了系统在定态的稳定性。在远离平衡态，系统在定态的稳定性并不像在近平衡态那样总有保证，在一定条件下，系统有可能失稳而产生新的稳定时空有序结构。

(5) 涨落

涨落也叫扰动，是指系统的某个变量或某种行为对平衡值的偏离。涨落是偶然的、随机的、杂乱无章的，在不同状态下作用不同。耗散结构理论认为，在接近平衡态的线性非平衡区，涨落的发生只使系统状态暂时偏离，这种偏离状态不断衰减，直至回到稳定状态。而在远离平衡的非线性区，系统中一个随机的微小涨落，通过非线性的相互作用和连锁效应被迅速放大，就可以形成整体的宏观的“巨涨落”，从而导致系统发生突变，形成一种新的稳定有序状态，即所谓“涨落导致有序”。

(6) 耗散结构静态稳定性判据

对于一个开放系统，如何控制外界因素，找出系统稳定性条件，使系统维持稳定的有序结构？以耗散结构基本的演化方程 $dX/dt = f(X, A)$ 及相应的 Fokker - Planck 方程为基础，导出一般耗散结构势函数 $G(X, A)$ 的普遍表达式，得出了系统静态解 ($dX/dt = 0$) 稳定性的势函数判据为： $\frac{\partial G}{\partial X} = 0$ ， $\frac{\partial^2 G}{\partial X^2} > 0$ ；同时给出了系统临界点稳定性条件： $\frac{\partial^3 G}{\partial X^3} = 0$ ， $\frac{\partial^4 G}{\partial X^4} > 0$ 。由于推导过程中未涉及任何具体形式的系统，因而更具广泛普适性，可用于物理、化学、生物等各种耗散结构。

1.4 耗散结构的两个假设

耗散结构的基础，即非平衡热力学可分为近平衡态热力学和远离平衡态热力学。近平衡态有两个重要的假设，即局域平衡和部分平衡假设。

1) 局域平衡假设：当系统处于近平衡时（系统总的来说是不平衡的），系统参量的空间变化不甚剧烈，若考虑到系统中的任一微区，当微区的体积足够小时，热力学状态参量在微区内的变化就小得可以忽略了，这时微区可看作热力学平衡，称局域平衡，从而保证经典热力学方法可用于微区，然而对系统中任何两个不同的微区，其平衡的数据可能是不相同的。例如，矿液在沿着围岩裂隙运移并与围岩进行化学反应过程中，矿液内各点的温、压和化学成分是不相同的，但只要流动比传导慢得多，反应速率比物质扩散速率小得多，就可以认为矿液处于局域平衡，或者从另一角度说，在岩浆和围岩接触带附近，由于温度梯度很大，系统可能远离平衡态，产生耗散结构，而在离接触带较远处，可能处于近平衡态，处于局域平衡。

2) 部分平衡假设：当系统进行非平衡化学反应时，可能并不影响系统的温度 T 、压力 P 或其他状态参量。部分平衡假设就是假定系统的一部分状态参量处于非平衡时，有可能其余状态参量处于平衡，对这些变量可应用经典热力学公式。

由于有了这两个假设，使得我们有可能采用经典热力学的理论和方法来进行研究，但

不同的是研究系统变为研究微区。

1.5 耗散结构的分支与突变

在自然界，某些比较单一的过程，如简单的扩散作用、两物体之间的机械运动等，可认为是线性的，而对于运动着的三个以上的物体之间，则情况要复杂得多，常出现多解性和随机性，也即是非线性的。对于一个非线性的动力学系统，可用非线性偏微分方程——反应-扩散方程来描述，这种情况用数学分支理论表述比较清楚。当约束条件未达到参数 λ_0 时，作用的结果只要一个解；当达到 λ_0 以后，则出现多个分支解。这里与 λ_0 相对应的点称为分支点， λ_0 相当约束条件的阈值，也就是说，在分支点前为线性的近平衡区，而分支点以后，则为非线性的远离平衡区，因而出现了多解性与随机性。正因为如此，才使系统产生许多可能的状态，它们之间的转换状态与外界约束相呼应。也只有这样，才有可能通过巨涨落产生新的相变，形成新的稳定影响结构，即耗散结构。

耗散结构理论揭示了热力学系统从平衡态到远离平衡态的演变规律，系统的行为如图1.2所示，横坐标 λ 表示外界对系统的控制参量，如贝纳德对流实验中的温度梯度或激光系统的输入功率，其大小表示外界对系统影响的程度以及系统偏离平衡态的远近。纵坐标 X 表征系统定态的某个参量，如激光系统的相干光强度，不同的 X 值表示不同的定态。图中与 λ_0 对应的定态 X_0 表示平衡态。对于一个给定系统，当系统由于涨落等因素影响，使系统内部状态参量或外界约束条件 λ 改变时，定会引起系统的组分浓度变化。随着 λ 偏离初始条件 λ_0 ，系统 X 值也就偏离平衡态值 X_0 ，过渡到近平衡定态，系统遵循最小熵产生原理，处于稳定状态。当 λ 较小时，系统的状态类似于平衡态且具有稳定性。所有表示这种非平衡定态的点形成的线段a，称为稳定热力学分支。当 $\lambda \geq \lambda_c$ 时，如贝纳德对流实验中，流体的温度梯度达到并超过某一定值时，或者当激光器的输入功率达到某一定值时，曲线段a的延伸虚线b上各非平衡定态变得不稳定。一个微小的扰动（涨落）就可

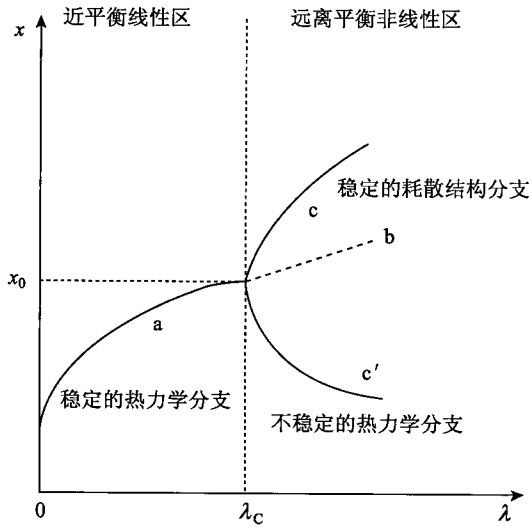


图 1.2 分支现象

以引起系统的突变，使系统的状态离开热力学分支而突变到另外两个稳定的分支 c 或 c' 上。临界值 λ_c 通常称为分叉点。一个远离平衡态的开放系统，通过和外界不断交换物质和能量，非平衡定态可能变得不稳定，在一定条件下，演变过程可能会发生突变，从原有混乱无序状态转变为一种新的稳定的时空有序结构。在这两个分支上的每一点可能对应于某种时空有序状态，这种现象称为耗散结构分支现象。这种有序状态是在系统远离平衡态，或者说是在不可逆的耗散过程足够强烈的情况下出现的，这就是普列高津的耗散结构。

1.6 耗散结构形成的条件、特点和混沌状态

耗散结构形成的条件：①系统必须是开放的，通过与外界交换物质和能量，引入负熵流，才可能从无序走向有序；②系统必须足够地远离平衡态，才能保持对涨落的敏感性，在临界点上产生突变，从而不断组织起来，形成新的稳定有序结构，非平衡是有序之源；③系统内要有非线性的相互作用因素（描述贝纳德对流的动力学和激光光强方程，都是非线性的），才能产生相干效应和协调一致的动作，产生突变和分叉，形成宏观有序结构，非线性动力学方程，有多重解，有稳定解和不稳定解，从而使系统的演化发展可能出现几种不同的结果，产生了进化的多样性和复杂性；④系统从无序向有序的演化，是通过随机的涨落来实现的。系统内的涨落，由于非线性作用的放大，形成巨涨落，因此，普列高津说：“在耗散结构里，在不稳定之后出现的宏观有序是由增长最快的涨落决定的。因此，这种新型的有序可以叫做‘通过涨落的有序’”。自组织系统所必需的远离平衡状态，需要涨落才能得以维持，涨落是系统形成自组织的触发器。这4个条件紧密相连，互为支持，保持开放性是基本前提，远离平衡态是必要条件，非线性机制是内在基础，而涨落则是发展的诱因。

耗散结构一般具有以下特点：①耗散结构只能发生在开放系统；②只有当控制参数达到一定“临界值”时，它才突然出现；③它具有时空结构，对称性低于达到临界值前的状态；④耗散结构虽是旧状态下的产物，但它一旦产生，就具有相当的稳定性，不被任何微小扰动所破坏。

耗散结构系统有区别于其他一般系统的结构特征。表现在：①耗散结构系统是开放系统。开放，系统才有可能与外界作交换从而获取负熵流。②耗散结构系统中各要素、各子系统间呈现非平衡状态，系统整体上是非平衡的“活”的有序结构。一个有完全平衡、对称结构的系统，意味着它的任一部分无差别，各部分各自孤立、毫无联系，整体上呈现完全稳定的状态。这种系统内部缺乏活力状态，是一种死系统。而耗散结构系统中各要素、各子系统相互联系，相互制约，整体上看是有序的“活”结构。这种非平衡的结构，是负熵流得以合理流动的基础。③耗散结构系统中各要素、各子系统的相互作用呈现一种非线性机制。这种非线性机制使各要素、各子系统相互间有机联系、形成默契，有利于环境输入物的合理分配。④耗散结构系统中各子系统存在竞争机制，系统整体上呈现涨落的特性。由于系统内部的非平衡，各子系统彼此攀比，争夺进入系统的输入物以维持本身的有序。竞争结果使系统的某些局部占优势，某些局部处于劣势。另一时刻，系统内部的优