

全国非平衡统计物理会议 论文集

大连 . 1980

PROCEEDINGS OF THE SYMPOSIUM ON
NON-EQUILIBRIUM STATISTICAL PHYSICS
DALIAN, CHINA 1980

编辑: 大连铁道学院学报编辑室
印刷: 大连铁道学院印刷厂
校址: 大连沙河口区西山村

1980年 12 月

序

这是全国非平衡统计物理第二次学术会议，即大连会议的会刊。

这次会议是在中国物理学会的领导下，由东道主大连铁道学院、大连工学院及辽宁大学三个单位辛苦筹备，于1980年7月24日至30日在大连召开的。这次会议开得很活跃，参加单位近70个，代表近100人；论文报告36篇，既讨论了布鲁塞尔学派的耗散结构理论，也开始进行了西德哈根学派的协同作用学的学习和探讨。的确，在非平衡统计物理方面，我们的工作开展还是不太慢的，特别是社会上人们对它的看法，对它的兴趣，广泛地有所改变，有所提高了。这是一个可喜的现象。

去年的会议是在西安开的，它是我们非平衡统计物理的第一次学术会议，或称西安会议。那次会议的会刊也出版了。这也是一件可喜的事情。如果把这两次会刊作一比较，不难看出，在数量上和质量上，我们都有了相当可喜的进步。至少可以说，我们这个孩子是在成长着哩。

在西安会议时，布鲁塞尔学派创始人 Prigogine 教授曾来参加会议、做报告及座谈；这次大连会议期间，布鲁塞尔名教授 Nicolis 又来参加，给我们做了一些系统性的报告，也和我们举行了几次座谈。有朋自远方来，盛会盛会！两位教授先后来参加我们的会议，对我们鼓舞甚大，足见中比两国人民的友谊大有进展，布鲁塞尔学者和我们的交情日益深厚了。这又是令人值得喜慰的一件事情。

诚如布鲁塞尔学派和西德哈根学派所表明的，非平衡统计物理的前程是光辉灿烂的，最大的特点是它的应用日益广泛，渗入了各门学科，不仅在自然科学领域中起着重大作用，而且，即使在社会科学（如哲学、教育学等）中亦显示着重要的指导性意义。我们深信，这项研究是大有前途的，我们应该努力坚持下去。

各种知识，各门学科，内容悬殊，方法亦异。可是，都有一个共同的现象，即都在演变和发展着。当前看来，似乎可以说，非平衡态的研究是一把打开这一奥秘的钥匙。我们相信，利用这把钥匙我们不仅在学术上可取得一些爆炸性的成就，还可以沟通各门学科，团结各个领域的工作者，创造出新的巨大成绩，更好地为四个现代化服务。

最后，让我们感谢大连铁道学院科研处，他们在百忙之中，耐心辛苦地为这次会议编印了这本会刊。

江 仁 · 寿

1980年9月7日

1980年全国非平衡统计物理会议论文集

目 录

序..... 江仁寿

· 专 题 报 告 ·

涨落与非平衡相变..... 湛垦华、任光耀 (1)
关于西德 H.Haken 学派: 非平衡有序结构形成理论基础的介绍
..... 金百顺、陈 水、郭治安 (25)
非线性映象分支点结构中的一些普遍规律和普适常数..... 郝柏林 (43)
马尔可夫过程与耗散结构理论..... 汪培庄 (49)
分子手性动力学..... 徐京华 (67)

· 论 文 摘 要 ·

非平衡系统 Master 方程的稳定性..... 李占柄、严士健、刘若庄 (75)
以推广的爱因斯坦关系研究非平衡系统的稳定性与涨落..... 马本堃 (77)
复标量场中的 $V(\phi) = \frac{1}{2}K|\phi|^2 - \frac{1}{2}K|\phi|^4$ 形式自耦合效应
——分支点理论的应用..... 易希璋 (83)
激光系统中耗散结构的探讨..... 张纪岳、郭治安 (89)
双模激光器非平衡定态的分析..... 孙懋琮、陈继述 (95)
关于激光共振腔内耗散结构形成问题的‘精确’的动力学考察..... 金百顺 (101)
三分子反应扩散方程的球对称时间耗散结构..... 潘 湘、张纪岳、郭治安 (111)
无浓度扩散时 Prigogine 的三分子模型的行为
..... 张 棣、陈治融、湛垦华 (121)
多重耗散结构的相转变初探..... 张 棣、陈治融、湛垦华 (133)
由 Hanusse 定理的完整化而导出一个新定理..... 湛垦华、谢大来、汪培庄 (139)
非平衡热力学中恒星结构的稳定性研究
II, 碳-氮-氧循环..... 黄克谅、彭秋和、王振一、湛垦华、何香涛 (143)

辐射函数 $P_1(T, \Delta E_1)_0$ 的物理内容.....	朱灿生 (147)
低纬度电离层的稳定性问题.....	王鸿謨、候文贵 (151)
翻译水平的动力学模型.....	陈润生 (157)
自组织系统在临界点附近的动力学.....	王宝翰 (163)
丙二酸的催化反应.....	赵莲青、张 棣、陈治融 (169)
分子手性和生物学时间箭头.....	徐京华、丁达夫 (173)
多酶系统中负反馈抑制作用的稳定性分析 (信号处理方法在协同作用学方面的应用)	黄德民 (177)
不对称外力对自发镜象对称性破缺的选择作用.....	刘为民 (181)
环境涨落诱导体系双稳态的 Lefever-Horsthemke 模型的临床应用 ——静脉注射人胚核蛋白制剂诱导染色体减少	卢 侃、张洪基、郑宝发 (185)
生态系统中的能量流的分解与能量最小耗损原理.....	朱振源、马芬荣 (193)

· 论 文 题 目 ·

会议其余交流论文目录.....	(197)
-----------------	-------

后 记

PROCEEDINGS OF THE SYMPOSIUM ON NON-EQUILIBRIUM STATISTICAL PHYSICS

DALIAN 1980

CONTENTS

Preface.....Y.S. Chiong

• LECTURES •

- Fluctuations and Non-equilibrium Phase Transform
.....Zhan Ken-hua, Ren Guang-yao (1)
- On the Western German H. Haken School, Introduction to the
Theoretical Basis of Non-equilibrium Order Structure
Formation..... Jin Bai-shun, Chen Shui, Guo Zhi-an (25)
- Universal Properties and Universal Constants in Bifurcation
Structure of Nonlinear Mappings..... Hao Bai-lin (43)
- Markov Chain and Dissipative Structure..... Wang Pei-zhuang (49)
- Molecular Chiral Dynamics..... Xu Jing-hua (67)

• PAPERS •

- On the Stability of the Multivariable Master Equation for
Non-equilibrium Systems
.....Li Zhan-bing, Yan Shi-jian, Liu Ruo-zhuang (75)
- Stability and Fluctuation of Non-equilibrium Systems Was
Analysed in Terms of the Extension of Einstein's Relation
..... Ma Ben-kun (77)

Effect of Self-coupling with the Form $V(\phi) = \frac{1}{2}K|\phi|^2$

- $\frac{1}{2}K|\phi|^4$ in Scalar Field—Application of the

- Bifurcation Theory..... Yi Xi-chang (83)
- A Study of Dissipative-structures in Laser Systems
..... Zhang Ji-yue, Guo Zhi-an (89)
- Analysis of Non-equilibrium Steady States of a Two-mode
Laser Sun Mao-tsung, Chen Chi-shu (95)
- An 'Exact' Dynamical Investigation Concerning the Problem of
Laser Intracavity Dissipative Structure Formation
..... Jin Bai-shun (101)

Spherical Temporal Dissipative-structures of Trimolecular Reaction-diffusion EquationsPan Xiang,Zhang Ji-yue,Guo Zhi-an (111)	
Without Concentration's Diffusion the Character of Prigogine's Trimolecular ModelZhang Di, Chen Chih-yung,Zhan Ken-hua (121)	
On the Phase Transition Phenomena of the Polyfunctional Dissipative-structuresZhang Di,Chen Chih-yung, Zhan Ken-hua (133)	
A New Theorem Deducing Form the Completion of Hanusse's Theorem.....Zhan Ken-hua,Xie Da-lai,Wang Pei-zhuang (139)	
Stability of the Stellar Structure in Non-equilibrium Thermodynamics II.C-N-O CycleHuang Ke-liang,Pen Qiu-he,Wang Zheng-yi, Zhan Ken-hua,He Xiang-tao (143)	
The Physical Contents of the Radiation Function $P_1(T,\Delta E_1)_G$ Zhu Can-sheng (147)	
On the Stability of Low Latitudes IonosphereWang Hong-mo, Hou Wen-gui (151)	
Dynamic Model of Translation Phase..... Chen Run-sheng (157)	
Dynamical Analysis in a Self-organization System near Critical Point..... Wang Pao-han (163)	
Catalytic Reaction of Malonic Acid Chao Lian-tsing,Zhang Di,Chen Chih-yung (169)	
Molecular Chirality and Biological Time ArrowXu Jing-hua,Ding Da-fu (173)	
Stability Analysis of Negative Feedback Inhibitions in Multi- enzyme Systems (Applications of Signal Processing Techniques in the Field of Synergetics) Huang De-min (177)	
Selection Effect of Dissymmetric External Forces on Spontaneous Mirror Symmetry Breaking..... Liu Wei-min (181)	
Clinical Application of Lefever-Horsthemke's Model of System Bistability Induced by Environmental Fluctuation —Intravenous Injection of Human Embryo Nucleoprotein to Reduce the Number of Chromosomes Lu Kan,Chang Hong-ji,Zheng Bao-fa (185)	
Resolution of Energy Flow and Principle of Minimum Loss of Energy in an Ecosystem Zhu Cheng-yuan,Ma Fen-rong (193)	

• PAPERS(WITH THEIR TITLES ONLY) •

Other Papers Presented to This Symposium.....	(197)
---	-------

Afterword

涨落与非平衡相变

湛 星 华 任 光 耀

(西北大学)

(新疆大学)

在热力学与统计物理这门学科中,相变现象学说占据着一个相对独立的位置。

近年来,对非平衡相变的研究,是学术界一个较为活跃的部门。人们从不同的物理角度,用不同的数学方法,对于非平衡相变的形成和性质,进行了多方面的探讨。

在关于非平衡相变的众多学说中,布鲁塞尔学派的涨落作用学说,占据着一个突出的位置。依我们看来,它的物理图象是较为清晰的,据有着发展的优势。本文的任务,就是对布鲁塞尔学派所提出的非平衡相变的性质以及涨落在其形成、转变过程中的作用的理论,作一概要性评述。

由于非平衡相变的结果,是在远离平衡的非线性非平衡状态下生成稳定有序的耗散结构,因此谈非平衡相变,也可以说是从一个特定角度来讨论耗散结构的形成和转变。因而本文也可叫做“涨落与耗散结构的形成和解体”。但由于着重点在“相变”这一范畴,故不可回避的是更多地同平衡相变进行比较,以及对平衡相变的理论进行修正后的借用。

一、从平衡相变谈起

至今为止,应该说,人们对于平衡相变现象和本质的研究,已相当成熟了。为了更好地阐明非平衡相变的形成机制和物理本质,作为对照,从讨论非平衡相变所需的角度出发,先简要地提一下与其对应的平衡相变的现象和理论,是必要的。

在平衡状态下,气、液、固三种状态的转变,铁磁体和顺磁体的转变,氦I和氦II的转变,合金的有序和无序的转变,铁电体相变,金属的超导转变等,都属于平衡相变。

相变是一个质变过程,或者说是某种物理特性的突变。但我们可找到物质在各相中的化学势相等这一条,作为普遍的相平衡条件。

在通常的气相、液相和固相的相互转变中,物质的化学势不变,而化学势的一级偏微商所代表的物质(物质的比容 v ,摩尔熵 S)发生突变,后者表现为潜热 L 的释放或吸收,即 $L = T(S_2 - S_1)$,用热力学关系来表示这类平衡相变时,有

$$\mu_2 = \mu_1$$

$$v_2 \neq v_1, \text{ 即 } -\frac{\partial \mu_2}{\partial P} \neq -\frac{\partial \mu_1}{\partial P} \quad (1.1)$$

$$S_2 \neq S_1, \text{ 即 } -\frac{\partial \mu_2}{\partial T} \neq -\frac{\partial \mu_1}{\partial T}$$

这种相变被称为一级相变。其相变平衡性质由克拉珀龙方程表示：

$$\frac{dP}{dT} = \frac{L}{T(v_2 - v_1)} \quad (1.2)$$

原则上可由它求出相平衡曲线 $P = P(T)$ 。

而超导、超流、铁磁、铁电等相转变中，既没有潜热的释放，比容也不改变，但物质的比热容发生突变，膨胀系数 α 和压缩系数 k 也发生突变。如果用热力学的关系表示，则可写为

$$\mu_2 = \mu_1$$

$$v_2 = v_1, \text{ 即 } \frac{\partial \mu_2}{\partial P} = \frac{\partial \mu_1}{\partial P}$$

$$S_2 = S_1, \text{ 即 } -\frac{\partial \mu_2}{\partial T} = -\frac{\partial \mu_1}{\partial T}$$

$$C_{P2} \neq C_{P1}, \text{ 即 } \frac{\partial^2 \mu_2}{\partial T^2} \neq \frac{\partial^2 \mu_1}{\partial T^2} \quad (1.3)$$

$$\alpha_2 \neq \alpha_1, \text{ 即 } \frac{\partial^2 \mu_2}{\partial T \partial P} \neq \frac{\partial^2 \mu_1}{\partial T \partial P}$$

$$k_2 \neq k_1, \text{ 即 } \frac{\partial^2 \mu_2}{\partial P^2} \neq \frac{\partial^2 \mu_1}{\partial P^2}$$

就是说，化学势的二级偏微商所代表的性质发生突变，因而称这类相变为二级相变。其相变平衡性质由范仑菲士特方程描述：

$$\frac{dP}{dT} = \frac{C_{P2} - C_{P1}}{Tv(\alpha_2 - \alpha_1)} \quad (1.4)$$

不管是一级相变，还是二级相变，它们的共同特点是：有一个临界点 T_c （相变点），在 T_c 以下序参量不为零，但当 $T \rightarrow T_c$ 时序参量趋于零，在临界点 $T = T_c$ 处有对称的破坏，而且是跃变式的，它可以是由原子位移引起，也可能是由晶体有序程度的改变引起。正因为这一特点，朗道提出了著名的平衡相变本质的理论解释。按照朗道的解释，不论一级相变或二级相变，都是物质结构有序度的一种改变。例如，通常固相转变为液相的一级相变，是和固相有序度较高的结晶构造（原子在固定平衡位置附近振动）转变为液相有序度较低的准结晶构造（原子在移动的平衡位置附近振动）相联系的。铁磁体转变为顺磁体的二级相变，是和电子自旋的有序排列转变为无序排列相联系

的。合金有序无序相变,是合金的结晶点阵中各种金属原子相互排列次序的改变。要使有序的结构破坏,必须供给一定的能量。在一级相变中,有序结构的破坏是突然发生的,所以在相变过程中需吸收潜热。在二级相变中,有序结构的破坏是逐渐地连续地发生的,在有序结构的逐渐破坏的过程中,物质从周围逐渐吸收热量。因此在转变点没有大量吸收潜热的现象。但是,在二级相变中,有序结构破坏的速度逐渐增加,温度较低时,有序结构的破坏较慢,所需要吸收的热量较少,随着温度的升高,有序结构的破坏的速率越来越快,因而热容量突然增加。到了转变点,造成“雪崩式”的破坏,此时所需要的热量突然增加,于是热容量发生突变。

我们也可简单地说,一级相变是物态的突变,二级相变是同一物态中对称结构的突变。从数学观点看,二级相变点是它的热力学的某种奇点,特别是热力势(吉布斯函数)的奇点。一级相变点是两相化学势 $\mu_1(P, T) = \mu_2(P, T)$ 相等的点,对于 μ_1 和 μ_2 来说,这两个函数中的每一个函数在相变点的两侧各对应于物体的某一平衡态,可能出现过热或过冷现象。但在二级相变中,如果形式地把任一相的热力势越过相变点而延伸到另一侧去考虑,那么它根本不可能对应于任何平衡态,即 μ 不是极小值。因此在二级相变中不可能有过热或过冷现象出现,任一相要越过相变点而在另一侧去考虑是根本不可能的。

二、非平衡相变的特点

但是,在我们周围的大多数类型的对称突变,都是在平衡状态下发生的吗?其答案是否定的。无论是力学的、物理的、化学的、生物等方面,近十年来都提供出在非平衡状态下,也存在相变的丰富实例。下面来举几个典型的实例。

在化学方面的非平衡状态下,物体成分或结构的对称突变的实例以所谓化学钟为最典型。早在1921年, W. Bray 就报导,在过氧化氢混渗碘酸盐后,由于碘的氧化作用而催化分解出氢的化学实验中,他发现化学浓度达不到稳定值,其化学浓度按时间呈现一定的周期振荡。1960年, Belousov 和 Zhabotinski 发现,丙二酸在催化剂铈(Ce^{4+}/Ce^{3+} 氧化还原偶以硫酸盐形式加在溶液中)作用下被溴酸氧化反应中,在外加物种的一定浓度范围内,会出现浓度随时间周期性改变的化学振荡,周期为30秒,可持续50分钟之久,现通常把它称为 Belousov—Zhabotinski 反应。也就是在1960年,乙醇酸酯振荡被 Bretton Chance 等发现,这是一个惊人的发现,因这个由化学成分浓度改变的化学钟振荡,涉及到生物能问题;乙醇酸对活细胞是有很重要意义的物质,由它导致产生了 ATP 分子,而 ATP 在活细胞中担负着生命活力的重要角色。

在生物方面,所谓生物钟的韵律现象也在许多生命过程中的超细胞水平上显露出来。最明显的例子就是阿尔巴聚集过程。也即由孤立细胞,通过细胞间的定向反应,而走向许多不同细胞,依照某种规律,围绕许多中心而构成波状的生命链,然后再组成不同的生物体,其形成过程和链的形状,都呈现一定的周期韵律,而且它们都是在非平衡状态下进行的。

在物理方面,1960年出现的激光,是非平衡状态下呈现相变最典型的实例。一个气

体激光器, 当外界泵浦输送给原子系统的能量没有达到一定的临界阈值前, 每一个活性原子都独立地无规则地发射光子, 光子的频率、相位都是无序的, 整个光场系统处于无序状态。当泵浦能量加强到某一临界阈值时, 激光器会发射出单色性、方向性、相干性极好的受激发射光, 频率和相位都变成有序, 光场系统处于非平衡的有序状态, 若一旦泵浦能量弱于临界阈值, 这种非平衡的有序状态立刻瓦解。

在连续介质力学中, 贝纳德 (Benard) 不稳流, 是一个典型的非平衡相变。考虑处在不变的重力场中, 在两个无限平行的平板之间有一水平液层, 若下界面的温度保持 T_1 , 上界面的温度保持 T_2 , 且 $T_1 > T_2$ 。液体不断从下表面吸收热量, 又不断从上表面放出热量, 形成一个开放系统。当 $T_1 - T_2 = \Delta T$ 小于某一特征值时, 热量通过热传导的方式输送, 液体从宏观来看是静止的。当 ΔT 超过某特征值时, 液体内会出现无数个有序的六角形对流元胞, 在六角形对流元胞的中心, 液体向上流动, 在六角形元胞的边缘, 液体向下流动, 形成所谓的贝纳德花样, 此时热量的输送主要靠这种宏观的对流。一旦 ΔT 偏离特征温度, 贝纳德花样立刻瓦解。

把上面谈过的力学的、物理的、化学的、生物的各种非平衡状态下的相变实例归纳分析一下, 可以看出它们有下列的共同特征。

首先, 它们是在远离平衡的非平衡区域中实现的, 在近平衡的非平衡区是不可能实现的。而平衡相变是在系统处于平衡状态下实现的。

其次, 非平衡转变也有一个特定阈值, 而没有一个相转变范围。即只有一个相变点, 而不是一个相变区域值。这点是与平衡相变相同的。或者说, 非平衡相变是突变式的, 而不是量的累积。其无序—有序突变的性质, 与平衡态二级相变性质相似, 如激光突然形成时光波的相位和频率的突变有序, 就与二级相变中顺磁分子磁矩在居里点处取向有序突变相似。因而也可用类似二级相变所用平均场理论来近似地描述。

第三、非平衡相变都是在同一物态中的相转变, 而不涉及物态间的相转变, 当然也就没有物态转变时潜热的释放和吸收。也即是说, 非平衡相变的这一特性, 与平衡相变中的二级相变雷同, 而异于平衡相变中的一级相变。

第四、非平衡相变点两侧的性质, 与平衡态二级相变两侧的性质相似, 因而其相变平衡性质可用与范德瓦耳斯方程

$$\frac{dP}{dT} = \frac{C_{p2} - C_{p1}}{Tv(\alpha_2 - \alpha_1)}$$

相类似的数学方程来定量的描述。

第五、非平衡相变后所形成的稳定有序的耗散结构本身, 必须随时有外界的能量和物质的补充, 以有助于维持耗散结构本身的稳定, 若一旦不能充分地供给外界的能量和物质, 耗散结构立刻瓦解。这是与平衡相变完全不同的。平衡相变后的新结构, 是不需要外界供给能量和物质来维持其稳定的。

三、非平衡相变的热力学理论

下面, 我们从热力学的角度 (宏观角度), 来讨论非平衡相变。

我们首先必须找到一个表征非平衡状态的宏观物理量。

对于平衡热力学来说，我们已知起最重要作用的是熵 S 这个物理量或第二定律。第二定律用数学表示为

$$dS \geq 0 \quad (3.1)$$

它体现的事实是：不可逆过程会导致时间的单向性。此定律的内涵也可说成，体系存在着一个性质异常特别的函数，它只能随时间的演变而增加，它被称为 Lyapounov 函数。

对于孤立系统，熵是一个 Lyapounov 函数，对于其他的“边界条件”（如温度和体积给定的条件），Helmholtz 或 Gibbs 自由能也是 Lyapounov 函数。在所有这些情况下，系统演变到平衡态去由热力势的存在来表征。此平衡态对于非平衡来说是一个“吸收中心”。

推广到非平衡态，我们仍从热力学第二定律开始， S 的变化 dS 可以写成下面的形式（图1）：

$$dS = d_e S + d_i S \quad (3.2)$$

$d_e S$ 是来自外部环境的熵流， $d_i S$ 来自系统内部的变化即熵产生，并且

$$d_i S \geq 0 \quad (3.3)$$

$d_i S > 0$ 说明该系统经历不可逆的过程。若在一个运动系统中，一个不为零的流 $d_e S$ 能够维持，则甚至在一个稳定情况下（即 $dS = 0$ ），不可逆过程将继续进行下去。它们要求供应熵流并且它们将产生一个有关的 $d_e S$ ，有

$$d_i S = -d_e S > 0 \quad (3.4)$$

熵产生的效应，是耗数量的简单的量度。例如，一个金属的两头具有不同的温度时，能量通过系统被传导。能量流入的比例必须维持温度保持不变并在物体内部以热的形式表现出来。

熵产生率的量 $d_i S/dt$ ，表示了系统内的不可逆过程情况。在宏观范围内，一个空间或时间的状态量的变化标度，比个别分子运动特征的标度大。可给出一个简单的关系

$$P = \frac{d_i S}{dt} = \sum_j J_j X_j \geq 0 \quad (3.5)$$

其中 J_j 是与各种不可逆过程（如化学反应、热流、扩散）有关的速率。 X_j 是与此对应的强迫产生变化过程的广义力（化学亲和力、温度梯度、成分变量的梯度、化学势梯度）。方程（3.5）是不可逆过程的宏观热力学的基本方程。

现在，当这个系统变到接近热力学平衡或远离热力学平衡时，（3.5）式引起完全不同的预测。首先，熵产生在平衡时起着非常类似自由能的角色，对一切不可逆过程我们同时有

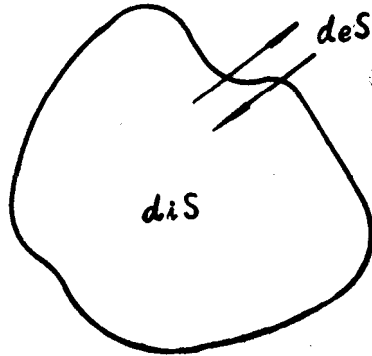


图1 非平衡开放系统的熵变

$$J_1 = 0$$

(3.6)

$$X_1 = 0$$

在特殊情况下，在限制条件范围内阻止系统达到平衡时，系统达到最低耗散的状态，或具有最小熵产生。其有效范围是在严格的线性区域内。它不是物质的一个真实的新状态。它相应一个被作用在系统上的约束引起的平衡态的畸变。它是非平衡系统的一种“惯性”。此外， $\frac{d_i S}{dt}$ 极小，保证了状态的任何偶然偏离都会被系统本身制止

(图2)。

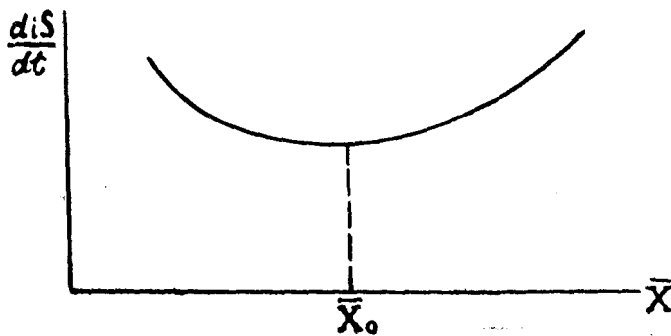


图2 最小熵产生定理的示意图

我们称这种性质为渐进稳定。它意味着系统不受干扰的影响。

在远离平衡后，情况将完全不同，甚至可能与最小熵产生原理相反。Glansdorff和Prigogine指出，非平衡系统是被物质流穿过的受约束的系统，并在和外界的相互作用中耗散能量。当系统从平衡越过平衡态的分支时，可以失去它的稳定性质。小的偏差消失，然后系统从这种状态过渡到一个与平衡性质完全不同的新的状态。它能够用空间和时间的有序表现自组织性能，这就是非平衡相变的过程。耗散结构这个术语是为了显示这些状态仅能和它们的环境共存；如果约束被解除，这个系统随着又接近于平衡状态，整个结构就会崩溃。

并不是所有系统远离平衡都能够导致自组织状态。在不同元素构成的系统之间由于反馈相互作用，非线性动力学也成为一个很重要的要素。它引起许多的可能状态，因此在它们之间的转换几率应与外界约束相呼应。

它涉及到反馈振荡的研究，而原材料的浓度必须达到维持一个非平衡态，坐标的估量受数值的制约。显示出，当振荡突然出现时，就穿过表面到达内部。此外，也取决于在图中的位置，可以有象双稳态现象、磁滞现象双重的周期等等。

当我们用化学反应的情况说明非平衡相变形成时，一个很有意义的问题就是对动力学定律加上适当的限制时，非平衡有序稳定态也可以出现。而在反应序列中至少有一步骤涉及到反馈。换句话说，一种化学成分应当直接或间接地影响其自身形成率或其他化学成分混合物的比率。这种情况最明显的了解，就是通过催化作用。特殊显著的一类就是涉及合作酶的过程。让我们来讨论一下简单的例子，即 Brusselator；



假如A、B、C、E（初始反应物和最终产物）与X、Y相比较是过量的，理想上它们的浓度要保持常数。注意到X和Y的同时存在提高了X的产生率，这样就在这个系统中产生了一个正反馈的环。

在化学平衡方面，A、X、Y、E的化学势和B、C相等就意味着（3.7）的逆反应率抵销前者的效果，这将排除任何不平凡的动力学特性。我们可以按照不变的比率提取A和B，並在C和E刚一产生时就把它排除的方法保持一种非平衡状态。我们对这种约束系统的作用很感兴趣。在适当地选取扩散系数和时间变数后，可以写出下列速率方程：

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \rho_x}{\partial t} &= \rho_A - (\rho_B + 1)\rho_x + \rho_x^2 \rho_Y + D_X \nabla^2 \rho_x \\ \frac{\partial \rho_Y}{\partial t} &= \rho_B \rho_x - \rho_x^2 \rho_Y + D_Y \nabla^2 \rho_Y \end{aligned} \right. \tag{3.8}$$

这两个看来简单的方程式，却有着千变万化的解答。这些答案不可能精确地求得（可有几个极限环），而只能求得近似值。我们把它称为 Turing 二分支。Turing 在 1952 年在其关于状态形成学的一篇经典文献中，第一个在化学动力学中注意到了这种可能性。当存在扩散的情况下，极限环也可能变成与空间有关，並引致化学波。（等式右端表示生成，或由于不同的化学步骤产生的 X 和 Y 的消耗率。如 X^2Y 表示一个 Y 分子两个 X 分子相互作用产生三个 X 分子的自催化。最后一项包括拉普拉斯算子，

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial X_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial X_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial X_3^2}; X_1, X_2, X_3 \text{ 是空间坐标。它们描}$$

述了扩散。）

这个结果的分析如下。在适当的边界条件下，如果我们对对应于热力学分支的解看成是基本解时，它担负着“最大无序”状态的角色，相当于没有自组织。通过平衡态热力学已经熟悉，並由 $\rho_X^0/\rho_A \cdot \rho_Y^0 = \rho_B/\rho_A$ 求得。由于这个理由，称它为热力学分支。从而其他的解就可由此基本解继续二分支导出，或由一个非热力学分支当作进一步的、离平衡的距离更远处的二分支而导出。但是，对于这些参数的临界值或分支值来说，各种分支解展现出对分支参数的唯一的依赖性（见图 3）。

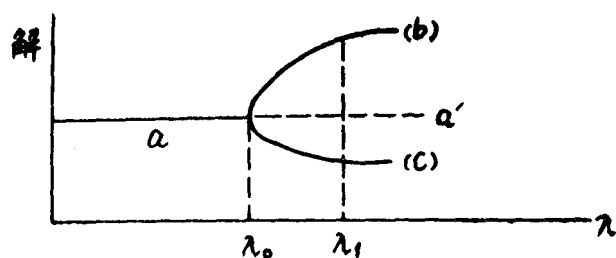


图3 分支图

有两种情况值得分析:

1. 借助从参考态到第一分支。实际上当它出现时, 在空间和时间上我们就有一个对称破坏。如图4。

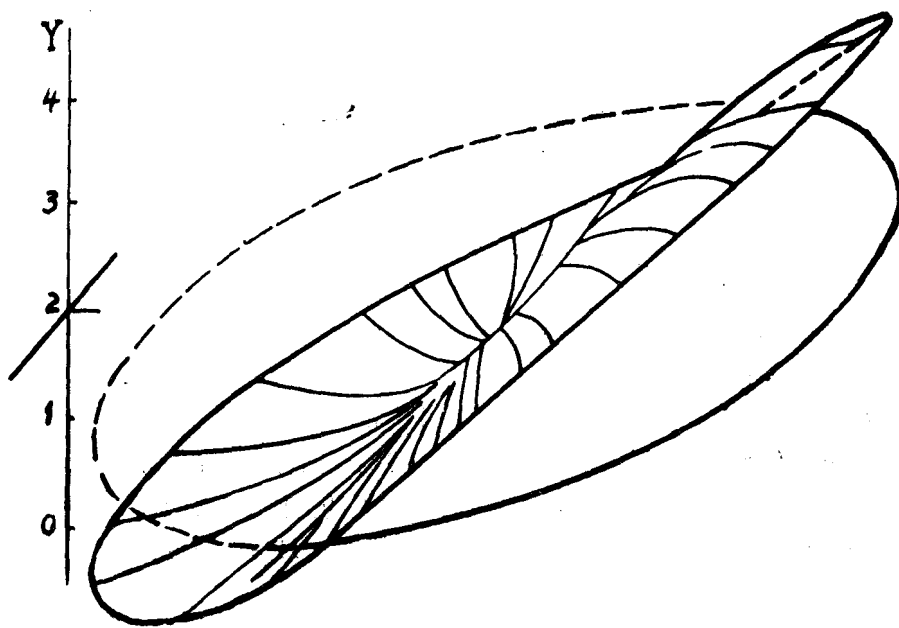


图 4

例如, 一个稳定结构相应于空间盘子的形式, 并开始和一个极轴对应, 而不变的解则失去其稳定性。另一种可能是出现叫做极限环(见图5)的稳定时间周期解。

与由摆和其他简单机械联合的周期性作用相反, 这些解对于所有这一类初始条件都可以达到, 而其振幅和周期取决于在速率方程中特性参数的出现。或许这样的化学钟, 就是非平衡系统和热力学平衡系统的行为的最为普遍的不同点。

2. 串联分支的几率

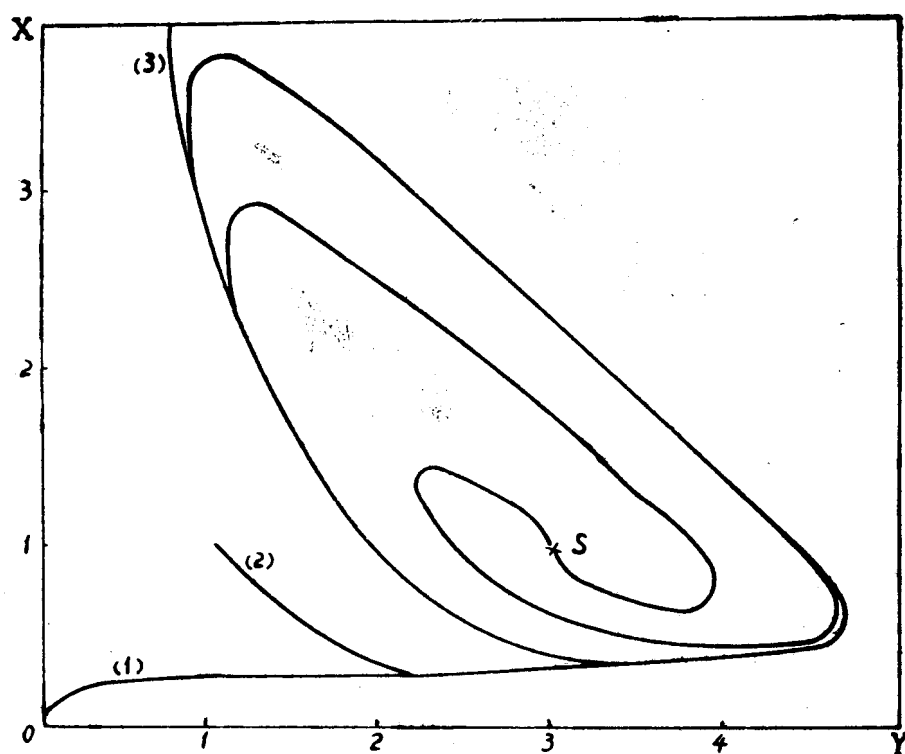


图 5

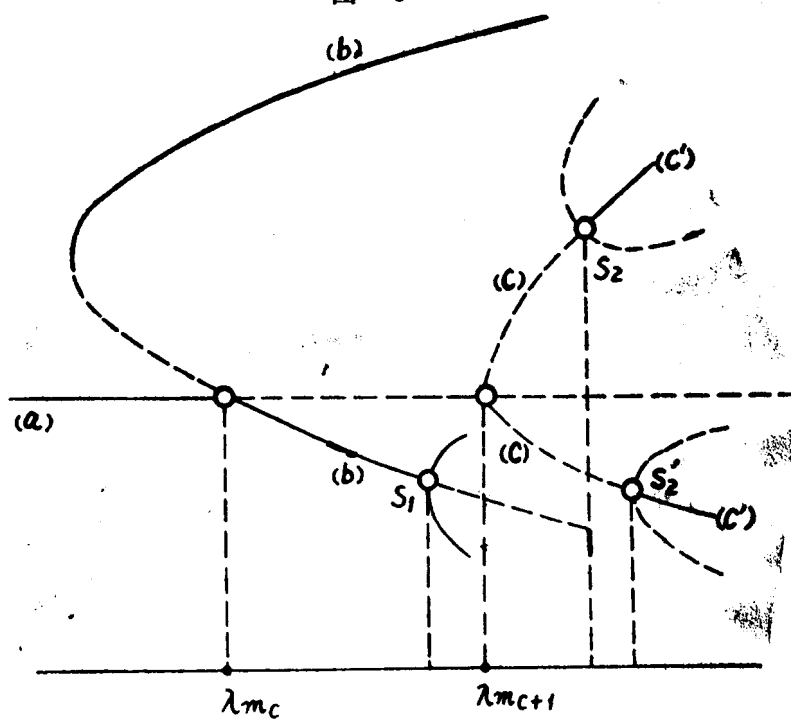


图 6

从图6的完整分支图中可见, 根据已经建立的结构, 除主要解刚被讨论外(曲线(b)、(c)…), 第二个和事实上第三个或更高的分支是可以分叉的。这个开放的途径为后面迷人的性质提供了可能性。一个主要的分支(曲线(c))作为一个不稳定解出现。但是, 在点 S_2 或 S_2' 上, 它经历的第二个分支是稳定的(图6中(c'))。所以, 我们有发展的可能性, 这种开放途径逐渐增加其复杂性, 由一个连续转变的机制导致(1)任一个最初分支的稳定性的消失和接着发生的、演变到二次解在空间和时间中显示的非对称性(图6中曲线(c'));(2)不稳定最初支的稳定。这后面的机制导致稳定转动波解。例如, Brusselator 已显示出这种转动可以导致稳定的转动波解。类似的, 对 Belousov—Zhabotinski 反应的转动波已由 Winfree 描述。

有关串联的分支是多重性现象的同时稳定解。在某种意义上说, 它把“历史”引进物理中了。因它们中的每一个, 都引起一个初始条件的不同规定。该系统在相应的初始状态所给出的这种方程中, 被赋予调节其行为的能力, 并通过结构的特征保持对往事的记忆。到目前为止, 一般说来, 所谓历史因素似乎只在研究生物、社会、文化等学科中才涉及。

多重解的存在起因于分支点远离平衡, 赋予一个系统稳定性质的能力并导出某些与记忆类型有关的方式。这里存在着一批正在生长着的涉及系统的非平衡相变, 包括模型构造和有规则的循环现象的信息数量。

关于非平衡相变在生物中的价值, 我们可研究模型构造和在胚胎发育期间的物种起源问题。

在发育期间, 一个不可被分化的细胞或细胞的排列在一个确定的瞬间, 经历一个显著的形态学上动能的变化。就是一对功能完全相同的细胞组合, 它们的发展结果即使是在同一规定过程的支配下, 也没有两个细胞在这个排列下能完全一致。甚至一个不分裂的单细胞也不是完全一样的。在其内部和表面的构造也不是完全一样的。象一条规律一样, 这种区别在物种起源中和最后出现的区别相比, 是不明显的, 甚至是无关的。这提醒我们, 最早期的物种是对称破坏的过程, 它与有共同起源的细胞组织的特殊部分的构造密切相关。

从这个意义上来说, 每个细胞意味着是一个很好的局部环境, 这个环境对所有细胞来说是不一样的。从生理学上讲, 位置信息的最著名的形式是由适当的物种的单调梯度在这个范围内建立一个极性。一个原始空间模型(即梯度)在这方面能很好的限制再生产性。若有些环境由相互干扰而破坏它们的话, 我们将会想到有机物能发展体内的平衡机制, 去抵制这种干扰, 并重新建立模型的总的形态。这种模式通过分支产生远离平衡, 正好享有这种性质。

除了在凝结媒质中外, 一个进化过程有时甚至象一个灾难性的变化, 如切断、嫁接等, 我们希望找到的模型能够对这些变化作出适当的反映。模式是通过非平衡相变产生的, 了解这些就提供了一种选择, 物种生长的一种特征长度 L 就象分支参量。如果 L 非常小, 只有空间的同种的状态, 对自然的边界条件是稳定的。除了在临界值 Lc_1 以上, 一个稳定的单调的物种的梯度产生, 直到第二临界值 Lc'_1 被达到, 于是这个模式消失。另一方面, 在某一个 Lc_2 ($Lc_2 > Lc_1$, 但可能 $< Lc'_1$) 可利用第二种模式, 这种模式是非单调的、集中的。继续生成就要显示出更复杂的集中的模型。他们的