

基于新广义变分原理的非平衡统计力学方法及应用

周金峰, 柴立和

天津大学环境科学与工程学院, 天津 300072

[摘要] 在近年来非平衡统计力学研究进展的基础上, 尝试从广义变分法的视角建立一套描述非平衡统计力学的新方法。即以对哈密顿原理进行修正得到的最大流原理为基础, 对开放的复杂系统建立新的统计系综, 构造出新的势函数, 并推导出随机动力学方程, 进而得出重整化方程并进行求解, 得到自相似的分形结构, 从而建立起一个新的统计力学理论框架。以城市系统为例, 结合自组织特征映射网络进行结构模式数值分析, 展示了新方法处理复杂系统的强大潜力。

[关键词] 统计力学; 最大流原理; 复杂系统; 城市模式

[中图分类号] O414, F290

[文献标识码] A

[文章编号] 1000-7857(2007)10-0023-07

Non-equilibrium Statistical Mechanics and Applications Based on New Generalized Variational Principle

ZHOU Jinfeng, CHAI Lihe

School of Environmental Science and Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China

Abstract: The recent progresses in non-equilibrium statistical mechanics are summarized and an attempt is made to build a new descriptive method based on a new variational principle. By employing Maximum Flux Principle, as modified Hamilton principle for open systems, a new statistical ensemble is developed and a new potential function is defined. Then the Langevin equation and the renormalization equation are obtained, through which the fractal structure is ultimately derived. A new framework of statistical mechanics is therefore outlined. With an example of quantitative analysis of urban system, it shows advantages and potentialities in dealing with universal open complex systems.

Key Words: statistical mechanics; Maximum Flux Principle; complex system; urban pattern

CLC Numbers: O414, F290

Document Code: A

Article ID: 1000-7857(2007)10-0023-07

0 引言

统计力学作为一门处理大量复杂客体的科学已经发展了 130 多年, 是唯一一门处理无穷维和无穷自由度问题的科学, 在处理分子碰撞等无穷维自由度问题上发挥了重要作用。经典统计力学(平衡统计力学)已发展出了优美的自洽结构体系, 而非平衡统计力学虽然近些年在随机统计力学、基于复杂动力系统的统计力学、基于最大信息熵原理的统计力学和非广延性统

计力学等方面取得了一定的进展, 但总体来说是步履艰难^[1-2]。就目前看来, 非平衡统计力学的理论并没有完美地建立起来, 它在处理非平衡的物理、化学、生物等结构、形态的起源、演化等方面仍存在巨大的困难。我们需要从新的视角去完善非平衡统计力学理论, 以克服当前非平衡统计力学所遇到的困难。

变分法在处理泛函极值问题方面具有非常独到的优势。从变分法的实质来看, 它采用的是一种结构性观

收稿日期: 2007-01-29

基金项目: 国家自然科学基金项目(50406018), 天津大学杰出人才引进基金项目(W20201), 教育部留学回国人员科研启动基金项目(413042)

作者简介: 周金峰, 男, 天津市南开区卫津路 92 号天津大学环境科学与工程学院, 硕士研究生, 研究方向为城市经济复杂系统、环境科学与工程等; E-mail: swolff.tju@gmail.com

柴立和(通讯作者), 男, 天津大学环境科学与工程学院, 副教授, 研究方向为非线性科学、统计物理、环境科学与复杂系统理论等; E-mail: lhchai@tju.edu.cn

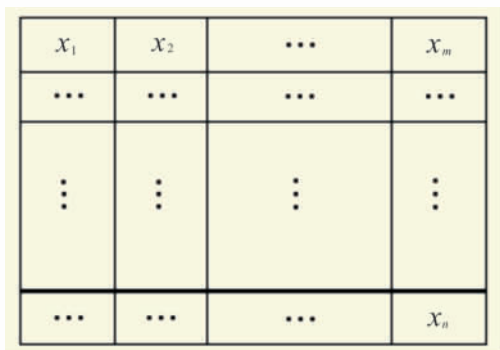
点,是比较系统演化进程中所有可能走的方式和经历。历史上哈密顿成功地将变分法与达朗贝尔原理及拉格朗日方程结合起来,归结为一个独立的力学变分方程,得到了力学经典原理——哈密顿原理,它直接导致了平衡统计力学的建立和完善。平衡或近平衡统计力学的成功正是由于找到了变分原理(如最大熵、最小自由能、最小能量耗散、最小熵产等)^[3]。显然对以复杂系统的组织结构起源为研究对象的非平衡统计力学来说,寻求相应的变分原理,对于非平衡统计物理学框架的建立具有重要意义。本文将尝试从发展变分法的角度建立描述非平衡统计力学的新方法。

1 基于广义变分法的非平衡统计力学

带参数拉氏乘子法是建立新变分原理的普遍方法,为近代兴起的广义混合变分原理提供了一个理论基础。选择好约束条件,通过拉氏乘子的广义变分原理是发展新变分原理的一个重要方法,也是拓展经典哈密顿原理的一个重要途径。下面笔者将从这一角度出发,发展变分原理的新方法和非平衡统计力学的新描述方法。

1.1 统计系综及势函数建立

首先,建立开放复杂系统的统计系综及其势函数。系综是一个虚构的抽象概念,代表了大量性质相同的(力学)体系的集合,每个体系分别处于相互独立的运动状态中。设定任意一个由 n 个子系统组成的复杂开放系统 Ω_k (图1),每个子系统的驱动力,即从环境获得广义流的动力或原因,可以表示为 $x_1, x_2, \dots, x_n$,写成向量的形式为 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$,驱动力可以代表速度差、温度差或浓度差等。



x_1	x_2	...	x_m
...	...	...	...
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
...	...	...	x_n

图1 相互作用的微观组元构成的统计系综 Ω_k

Fig. 1 An ensemble of interacting micro agents Ω_k

与经典统计理论一样,此处考虑所有的微观态在 Γ 空间形成一连续单元, $dx = dx_1 dx_2 \dots dx_n$ 为 Γ 空间的一个体积单元。 ρ 代表概率密度,则 t 时刻系统状态处于体积单元 dx 中的概率为

$$\rho(x, t) dx \quad (1)$$

设 t 时刻系统状态处于体积单元 dx 时获得的广义流是 J , 则所有可能的微观态所获得的平均广义流为

$$\bar{J} = \int \rho(x, t) J(x) dx \quad (2)$$

针对开放系统,笔者提出基于最大流原理的新方法:一个远离平衡的开放复杂系统总是寻找一种优化过程使得系统在给定的约束或代价下所获得的广义流最大。即利用拉氏乘子法,使方程(2)在下列约束(表示给定的代价,状态确定时 $f_1 \sim f_4$ 为常数)下取极大值,

$$\left. \begin{aligned} \langle x_i \rangle &= f_1 \\ \langle x_i x_j \rangle &= f_2 \\ \langle x_i x_j x_k \rangle &= f_3 \\ \langle x_i x_j x_k x_l \rangle &= f_4 \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

可以得到^[4]

$$\rho = \exp \left(\mu + \sum_i \sigma_i x_i + \sum_{ij} \sigma_{ij} x_i x_j + \sum_{ijk} \sigma_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{ijkl} \sigma_{ijkl} x_i x_j x_k x_l + \dots \right) \quad (4)$$

式中 μ 和 σ 均为常数。

方程(4)中的指数项可以看成势函数,它保证了参考状态的渐进稳定性。系统一旦远离平衡态,势函数的符号就是不固定的^[5],依具体情况可正可负。一般而言,势函数的符号主要取决于二阶项的系数,若势函数二阶项的系数小于0,系统形态将发生分岔行为,同时伴随着新的耗散结构形态形成。由于约束条件的复杂性(如系统开放、组元加入等),上述势函数与经典意义上的势函数,如自由能、熵或熵产等有本质不同,它可以包含系统开放、组元加入等特性,即反映复杂系统中变化的构型空间的特点。

1.2 导出随机方程

把方程(4)的指数项定义成势函数 Φ ,

$$\Phi(\sigma, x) = \mu + \sum_i \sigma_i x_i + \sum_{ij} \sigma_{ij} x_i x_j + \sum_{ijk} \sigma_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{ijkl} \sigma_{ijkl} x_i x_j x_k x_l + \dots \quad (5)$$

为分析系统相变行为,需要适当处理以获得系统的非平衡特性。将式(5)中的势函数进行如下变换

$$\xi_j = \sum_{i=1}^n a_{ji} x_i \quad (6)$$

式中, ξ_j 为子系统 x_i 的组合模式, a_{ji} 为子系统 x_i 之间的连接权值。

对变换后的常数项矩阵对角化,则势函数变为

$$\bar{\Phi}(\lambda, \xi) = \zeta + \sum_k \lambda_k \xi_k^2 + \dots \quad (7)$$

式中 $\lambda_k > 0$ 对应于不稳定模。

经过一系列推导^[4-6],可以得到广义 Langevin 方程为

$$\dot{\xi}_u = \lambda_u \xi_u + S_u(\xi_u, \xi_s) + F_u(t) \quad \lambda_u > 0 \quad (8)$$

$$\dot{\xi}_s = \lambda_s \xi_s + T_s(\xi_u) + F_s(t) \quad \lambda_s < 0 \quad (9)$$

式中, F 为系统的扰动力, S 和 T 为相应的函数, 下角标 u 和 s 分别对应于不稳定模式和稳定模式。当 $\lambda_k=0$ 时, 系统处于失稳的临界状态。

显然, 在系统确定的情况下, 可以得到函数 S_u 和 T_s 的表达式^[4]。Langevin 方程式是动态的, Langevin 力 $F(t)$ 反映了随机影响, 使系统从一个态跳到另一个态^[5]。事实上, 我们依靠组元或子系统的自组织作用, 得到了统计力学的基本方程——典型的演化随机动力学方程, 作为中观尺度上的动力学方程, 它等价于微观尺度上的(广义)哈密顿方程, 也等价于宏观尺度上的(偏)微分方程。这意味着原则上我们能从一个由微观角度定义的广义流势函数的变分出发导出所有的动力学方程。

1.3 重整化方程及其求解

ξ_u 和 ξ_s 代表了复杂系统的模式, 方程(8)和(9)则代表了复杂开放系统内模式随时间和空间的变化, 描述了复杂系统的斑图结构。但是由于方程(8)和(9)的解是在一个四维相空间(t, ξ, l, y)(t 为时间, l 为长大方向尺度, y 为系统截面尺度), 再加上方程的系数值未知, 故其求解相当困难。鉴此, 笔者求解系统演化的渐近行为, 获得稳定的斑图结构。

在不稳定点附近, 流的变化主要是由不稳定模式($\lambda_u > 0$)单独控制的^[6], 因此有

$$\bar{J}(\alpha_1) - \bar{J}(\alpha_2) \approx J_u(\alpha_1) - J_u(\alpha_2) \quad (10)$$

式中, α 为控制参数。

从上式可以看出, 在系统扩张过程中, 竞争能力强的子系统将争取到几乎全部广义流的增加份额, 并引起子系统的扩张, 表现在范围或规模的相应增加。不稳定系统及子系统的生长结构与流的分配机制有关, 在竞争与合作的关系中自组织起分层结构, 分形便不可避免地产生了。为了对复杂系统的结构形成进行量化描述, 需要考虑标度指数的求解, 为此必须得到其重整化方程, 即建立不同尺度或层次间耦合的关系式。当然对应生长的系统, 它的重整化方法不同于任何经典的方法, 系统长大的结构示意图如图 2 所示(u_s 为稳定模式下的广义流传递速度, δ_t 为对应 t 时刻的系统边界厚度)。

考虑两个任意尺度之间的广义流之间的关系: 上一个尺度的广义流, 输入的广义流和本尺度的广义流。根据广义流平衡可以得到如下尺度耦合方程 (Scale Coupled Equation, SCE), 即式(8)的重整化方程^[7-8]

$$\xi_s \frac{d}{dl} \int_0^\delta u dy - a \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \Big|_w = \frac{d}{dl} \int_0^\delta \xi u dy \quad (11)$$

对任意的 ξ 和 u , 由式(11)通常可以得到广义流传

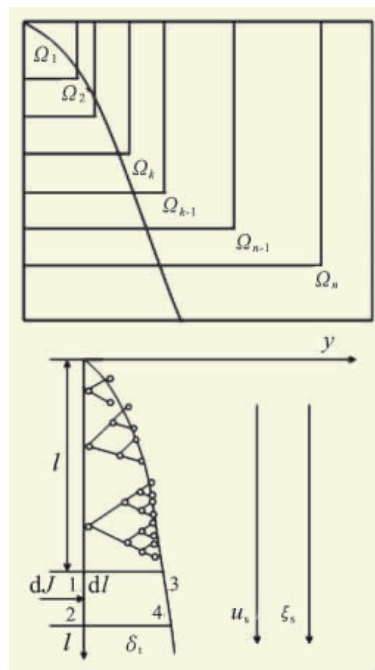


图 2 不断长大的结构示意图

Fig. 2 An illustration of growing structure

递速率的表达式为^[8]

$$h_n \sim l^{-p} \quad (12)$$

式中, h 代表广义流传递系数, p 为标度指数, p 取决于 ξ 和 u 的分布, 是介于 0~1 的特定参数。从而形成的分形结构为^[8]

$$\frac{\Omega_n}{\Omega_{(n-1)}} \sim \left[\frac{l_n}{l_{(n-1)}} \right]^{(D-p)} \quad D=1, 2, 3 \quad (13)$$

将 ξ_u 投影到(l, y)空间上, 在边界层里面考虑 ξ 的流型, 从而将对模式的分析转化为对流型的分析。经过对长大的开放系统重整, 所得到的标度指数实质上对应着分形生长结构的分形维数。可以看出, 方程(8)和(11)是任意系统层次结构形成和演化的基本方程。通过重整化方程, 将难以直接求解的非线性偏微分方程, 转化为边界层内的流型分析。广义流流型与 u 和 ξ 的分布相关。4 种理想流型及其对应的 u 和 ξ 分布方式, 以及分形维数之间的关系如表 1 所示。如果能够得到 u 和 ξ 的分布, 则可以求得系统的分形结构; 反之, 如果已知系统的结构(分形维数), 亦可以推出 u 和 ξ 的分布。

根据式(12), 可以建立方程

$$l^{-p} = r l^{-p_1} + (1-r) l^{-p_2} \quad (14)$$

其中, p_1 和 p_2 分别为不同的广义流典型流型对应的值; r 作为调节流动型态的参数, 反映各因素对广义流流动状态的综合影响, $0 \leq r \leq 1$ 。显然, $r=1$ 反映 p_1 的流态, 而 $r=0$ 反映 p_2 的流态。外界环境条件不同, 输入的广义流态也不相同。通过求解重整化方程(11), 得到 p 在不同区间时, 尺度对影响因素 r 与 p 关系的影响。从式(11)和

表 1 4 种理想流型及其对应的 p 指数和分形维数 $2-p$
Table 1 Influence of ξ and u distributions on p and flow patterns

流型类型	u 和 ξ 的分布	指数 p	分形维数 $2-p$
随机运动	$\frac{u}{u_s} \sim \frac{\gamma}{\delta}, \frac{\xi}{\xi_s} \sim \frac{\gamma}{\delta_t}$	1	1
层流	$\frac{u}{u_s} = \frac{3}{2} \frac{\gamma}{\delta} - \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{\delta} \right)^3, \frac{\xi}{\xi_s} = 1 - \frac{3}{2} \frac{\gamma}{\delta_t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{\delta_t} \right)^3$	1/2	1.5
湍流	$\frac{u}{u_s} \sim \frac{\gamma^{1/7}}{\delta}, \frac{\xi}{\xi_s} \sim \frac{\gamma^{1/7}}{\delta_t}$	1/5	1.8
极度湍流	$\frac{u}{u_s} \sim \left(\frac{\gamma}{\delta} \right)^{1/n}, \frac{\xi}{\xi_s} \sim \left(\frac{\gamma}{\delta_t} \right)^{1/n} (n \gg 1)$	0	2

(12)可以看出,一旦得到了 ξ 和 u 的分布,就可以确定系统的分形维数,从而得出系统的结构,得以解释现有统计力学解释不了的真实的大自然,可以很容易地解释多样性和统一性的起源。由于初始条件和边界条件的不同,也即是由于约束条件的不同,形成了不同的复制模板,复制模板包含子系统的遗传信息,控制系统的形成长大。同时,复制模板随着约束条件,也即外界环境的不同而发生改变和进化,由于模板的不同而导致了系统演化的多样性。同时,控制模板又是统一由 ξ 和 u 的分布决定,因此保证了系统的统一性。

1.4 基于最大流原理的方法对经典理论的继承与发展

在上述以最大流原理为基础的新统计力学框架中,从发展变分原理的新方法的角度,在约束条件中考虑复杂系统的开放性和非线性相互作用,建立新的统计系综和新的势函数,得到随机方程,并通过重整化方法直接得到复杂系统的分形结构,解决了复杂系统层次结构起源问题。这一思路与通过求解非线性偏微分方程得到的分形结构本质上是一致的,同时还具有良好的动力学基础和严格的统计力学基础。它具有如下特点。

1.4.1 对哈密顿原理的拓展

与哈密顿原理相类似,基于最大流原理的方法实质上是一个广义变分的极值原理的新方法,也是最小作用量原理在开放复杂系统中的新表现形式。哈密顿原理是保守物理系统的最高原理,但对开放复杂系统并不适用。笔者采用广义流(而不是熵或熵产)这一物理量,通过拉氏乘子法将诸多复杂的约束条件转化为能够处理的自然条件,同时考虑了系统的开放性和非线性,这种广义变分原理的新方法无疑是对哈密顿原理的重要拓展,为远离平衡系统的理论分析方法提供了一个重要候选。

1.4.2 与最大信息熵原理的一致性

基于最大流原理的方法保持了对非平衡统计力学理论的继承性。新的统计系综是吉布斯统计系综的推

广。广义流这一概念与熵的概念相对应,但熵在本质上是静态的,而流则能够反映系统的动力学特性。下面通过简单的变换得到这种方法与最大信息熵原理的一致性。

式(2)中, ρJ 的形式可以视为

$$C e^x \ln e^x \quad (15)$$

这里的 C 是一个常数,是由于 J 与概率密度函数的指数之间的差异所导致。如果将 ρ 视为 e^x 形式,则这种基于最大流原理的方法也可以描述为

$$\begin{aligned} \max \bar{J} &= \max \left(\int \rho(x, t) J(x) dx \right) \\ &= \max \left(\int \rho(x, t) \ln \rho(x, t) dx \right) \end{aligned} \quad (16)$$

而最大信息熵原理的一般表述为

$$\max H = \max \left(- \sum_k p_k \ln p_k \right) \quad (17)$$

式中, H 为信息熵, p_k 是对应的概率密度函数。

可见,基于最大流原理的方法与最大信息熵原理具有内在的深刻联系。同时,基于最大流原理的方法建立在统计力学基础上,具有叠加性和层次性,克服了最大信息熵原理的致命缺陷,直接考虑空间扩展的动力学,展示了新的时空观。

1.4.3 对复杂性科学的继承与发展

目前,在非平衡统计力学和复杂系统理论中,能够得到物质分形结构的只有自组织临界性理论(Self-Organized Criticality, SOC),然而,SOC 主要依赖于计算机模拟,并没有从理论上成功地得到分形结构。Nose-Hoove 等通过增加修正项的方式,试图实现对哈密顿原理在开放系统的拓展,通过在系综中进行“热浴”对系统输入能量来体现系统的开放性,并得到了相空间的分形。但是,相空间的分形不等于物质的真实分形。而基于最大流原理的方法得到了复杂系统的真实分形生长结构并拥有良好的动力学基础。面对远离平衡的开放系统,新的非平衡统计力学方法借鉴了复杂系统理

论研究的一些成果,在上面的理论分析中,主要涉及非平衡相变、序参量、自组织、竞争等方面。众所周知,非线性相互作用是物理学中最困难的问题之一,相互作用决定了物质的结构形态及其演变规律。基于最大流原理的方法在处理非线性相互作用上,采取自由度消去的方法,大量过渡态的相互作用(阻尼系数大)被消去,而把最终保留下来的相互作用汇总到序参量(即模板)上,促使系统向有序状态发生自组织转变。复杂系统层次结构形成和演化的基本方程(8)和(11)的提出,为复杂性科学研究最终形成科学的“范式”做了很好的铺垫。

2 实例研究

下面给出一个实例——城市复杂系统。

新的统计力学框架是一套完整的针对远离平衡的复杂系统,从微观组元的相互作用出发演绎宏观模式形成的理论,具有广泛的意义。它等价于非线性微分方程的建模方法。城市是区域经济发展的集聚中心,是人流、物流、资金流、信息流、技术流等城市广义流最为集中的枢纽地区,同时也是典型的远离平衡的开放复杂系统。若用非线性微分方程的求解思路,存在两方面困难,一方面是很多情况下难以列出方程,即使列出方程,往往也难以求解;另一方面是微分方程的思路不能很好地体现从微观组元的相互作用到宏观模式形成之间的联系。利用上述统计力学的基本框架,可以解释城市的自组织特性和演化发展的微观动力学机制,用非平衡统计力学的理论框架分析城市复杂系统的演化发展具有重要意义。下面,我们就城市分形维数与广义流流型、城市模式两方面进行数值分析。

利用 GIS 系统得到城市空间形态数据库,采用网格计数法等方法城市分形维数计算的常用方法。然而,分形维数仅仅表示业已形成的静态结构,结合上述理论框架,可以将分形维数与结构形成过程的微观动力学机制相联系,进一步利用分形维数分析宏观结构是如何在相互作用的微观组元之间形成的过程。根据李江测算的武汉市分形维数^[9]和冯健测算的杭州市区分形维数^[10],结合上述理论框架及表 1,可以对城市分形维数与广义流流型进行分析,得到武汉、杭州 2 个城市在不同时期的分形维数、 r 值和广义流流型的分析结果,如表 2 和表 3 所示。显然杭州的分形维数高于同时期武汉的分形维数,这是由于杭州的分形维数仅是市区的分形维数。

可以看出,随着社会经济发展和城市建设,武汉和杭州的分形维数逐渐增大,广义流流动也随之加剧,而城市中心的广义流流动比整个城市的广义流流动剧烈。表 2 中,由 r 理论值可以看出,1949—1978 年间武汉市输入的广义流流型为层流,到 1985 年流动比 1978 年明显,到 1998 年广义流流态变化显著,开始偏向湍

表 2 武汉市各时期分形维数变化及理论分析结果的比较
Table 2 Analysis of fractal dimensions of Wuhan city

年份	分形维数	p 值	r 理论值	流型特点
1949	1.134	0.866	0.012	层流
1957	1.143	0.857	0.014	层流
1965	1.170	0.830	0.025	层流
1978	1.240	0.760	0.047	层流
1985	1.347	0.653	0.178	层流主导
1998	1.426	0.574	0.425	层流主导

表 3 杭州市市区各时期分形维数变化及理论分析结果
Table 3 Analysis of fractal dimensions of Hangzhou city

年份	分形维数	p 值	r 理论值	流型特点
1949	1.467 9	0.532 1	0.805	层流向湍流过渡
1959	1.612 2	0.387 8	0.164	湍流主导
1980	1.653 4	0.346 6	0.260	湍流
1996	1.713 5	0.286 5	0.464	湍流

流发展,显示了高度发展的社会主义市场经济体制下城市与周围环境剧烈的物质、能量和信息交换。表 3 中,由于研究对象是城市的核心区域,广义流流动更为剧烈。1949 年杭州市区的广义流流动仍然是层流,但从 r 理论值可以看出流型已经开始向湍流过渡。随着经济发展,1959 年后的数据表明杭州市区的广义流呈湍流状态,系统和环境的交换非常剧烈。无疑上述理论揭示了城市分形的内在动力学机制。

利用新统计力学的理论框架,可以得到一套完整的关于城市经济微观组元相互作用到宏观城市模式的自组织形成过程。同时,新理论框架为自组织特征映射网络(Self-Organizing Map, SOM 网络)提供了理论基础,二者结合能够分析组元的自组织所形成的宏观模式^[11]。下面在 Matlab 中采用 SOM 网络进行城市状态指标与城市模式之间的关系模拟。根据 2003 年城市统计数据^[12],选取环渤海区域城市人口 200 万以上的 8 个城市——北京、天津、石家庄、唐山、沈阳、大连、济南和青岛,对原始数据进行处理得到非农业人口比重、人均 GDP、第二产业产值及第三产业产值占总产值的比重、人均住房面积、人均邮政和电信营业额、道路面积与城市建成面积比重、交通客运量和总人口比值、医生及人才占总人口比重、人均消费占人均工资比重等 11 项反映城市模式的状态参量,进行标准化和归一化使数据消除量纲,通过自组织得到反映城市模式的参量 ξ ,如图 3 所示。

由图 3 可以看出,由于政治中心的地位造成的人

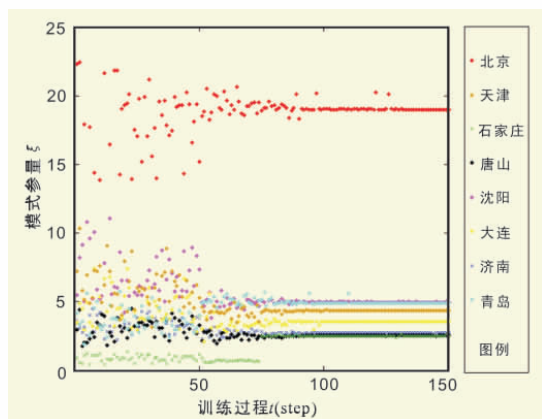


图3 SOM网络训练的模式形成过程
Fig. 3 Process of urban pattern formation by SOM

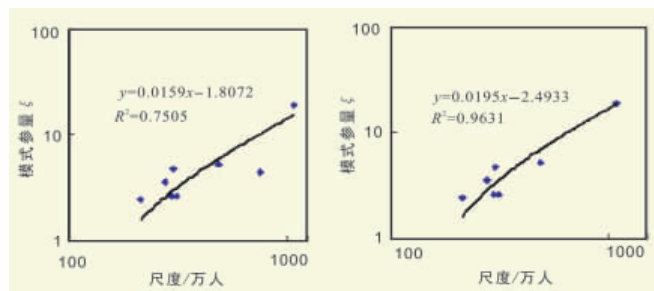
为集聚,北京的城市发展模式与其他7个城市截然不同。工业发达、城市发展成熟的沈阳、青岛、天津具有相似的发展模式;济南、唐山、石家庄具有相似的发展模式;而大连的发展模式较为独立。显然,模拟的城市模式分类和现实中城市模式具有很好的对应关系。这里得到的表示城市模式的参量 ξ 具有评价意义,具有聚类分析功能,但是其数值大小并不意味着模式的好坏,而是反映了城市在特定的环境系统下淘汰了各种不合适的可能模式后保存下来的模式。

模式参量 ξ 同时含有更进一步的信息。对于反映城市模式特征的一些指标,如人口、GDP等,具有典型的分形分布,这方面的研究已经很多。而考虑城市总体模式,通过上述理论框架得到的模式参量 ξ 同样具有分形分布。上述8个城市的人口^[12]和模式参量 ξ 数值见表4。如图4所示,以城市总人口(万人)为尺度, ξ 与尺度的双对数坐标轴具有较好的线性关系,可见从整个环渤海区域考虑,城市群内具有分形分布的城市模式。其中,天津市的人口758.3万,其 ξ 值却和沈阳、青岛接近,考虑排除天津的拟合,可以看出线性程度大大提高,相关系数由0.7505提高到0.9631,可以认为不考虑天津,其他7个城市具有很好的分形分布。这意味着天津的城市模式存在一定的欠缺,不利于城市经济发展和区域发展,需要进行必要的调整。当前以滨海新区为重点的新的发展规划,将大大改善天津的交通条件等周边环境因素,为广义流的传输提供更好的渠道,加速天津发展,使之具有合理的城市模式,促进环渤海区的经济发展。

以最大流原理为基础的新的统计力学框架不仅能够处理自然科学中的复杂系统^[4,6-8,13],对于城市这样的社会经济问题也能提供一定的理论分析,为城市发展规划提供指导。当然,目前的数值分析还是很初步的,新框架在开放复杂系统中的应用需要更多的尝试和进

表4 8个城市的总人口及其模式 ξ 数值列表
Table 4 Total population and ξ of 8 cities

城市	北京	天津	石家庄	唐山	沈阳	大连	济南	青岛
人口/万人	1 079.2	758.8	211.1	294.9	488.4	274.8	334.8	246.8
ξ	19.1	4.4	2.4	2.6	5.2	3.6	2.6	4.7



(a) 8个城市拟合 (a) Case for 8 cities
(b) 7个城市拟合(不含天津) (b) Case for 7 cities (without Tianjin)

图4 尺度(万人)与模式 ξ 之间的关系(双对数坐标)
Fig. 4 Linear relationship between scale (population) and pattern ξ (log-log plot)

一步的发展。

3 结论

基于最大流原理的方法作为广义变分原理的一个新方法,是对哈密顿原理进行修正得到的,以它为基础我们可以对开放的复杂系统建立新统计系统,构造出新的势函数,并能够推导出随机演化动力学方程,进而得出重整化方程,并得到自相似的分形结构,建立起一个新的非平衡统计力学理论框架。不同于非线性偏微分方程组方法,新变分方法方法避免了求解非线性偏微分方程组的种种巨大困难,利用巧妙的技巧实现了复杂系统的降维。这一方法不仅可以从全新的角度上揭示开放复杂系统层次组织结构的动力学机制,建立起从微观组元的相互作用到宏观模式的形成之间的联系,从理论上处理一般意义的开放的复杂系统,而且能够定量地结合自组织特征映射网络处理数据,得到理论中描述结构特征的新变量,结合特定的复杂系统,如生态系统甚至包括城市等社会经济系统等,具有很强的实证分析潜力,其结果能够为宏观现象的分析、系统行为的预测、控制和优化设计等提供参考和依据。

参考文献(References)

- [1] 普里戈金 I. 非平衡态统计力学[M]. 陆全康,译. 上海: 上海科学技术出版社, 1984.
PRIGOGINE I. Non-equilibrium statistical mechanics[M].

- LU Quankang, trans. Shanghai: Shanghai Scientific and Technical Press, 1984.
- [2] RADU B. Statistical dynamics [M]. London: Imperial College Press, 1997.
- [3] RUELE D. Is there a unified theory of nonequilibrium statistical mechanics [J]. Annales Henri Poincare, 2003, 4 (Suppl1): 489-495.
- [4] CHAI L H, SHOJI M. Self-organization and self-similarity in boiling systems [J]. ASME J Heat Transfer, 2002, 124: 505-517.
- [5] HAKEN H. Information and self-organization [M]. Second Enlarged ed. Berlin: Springer, 2000: 16-17, 48, 74-80.
- [6] CHAI L H. A theoretical analysis of bubble interaction in boiling systems [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2004, 43: 1067-1073.
- [7] 柴立和, 马德刚. 分形生长的新模型[J]. 天津大学学报(自然科学版), 2004, 37(4): 326-330.
CHAI Lihe, MA Degang. New model on fractal growth[J]. Journal of Tianjin University (Natural Science edition), 2004, 37(4): 326-330.
- [8] CHEN L M, CHAI L H. A theoretical analysis on self-organized formation of microbial biofilms [J]. Physica A, 2006, 370: 793-807.
- [9] 李江. 城市空间形态的分形维数及应用[J]. 武汉大学学报(工学版), 2005, 38(3): 99-103.
LI Jiang. Fractal dimension of urban spatial morphology and its application [J]. Engineering Journal of Wuhan University, 2005, 38(3): 99-103.
- [10] 冯健. 杭州城市形态和土地利用结构的时空演化 [J]. 地理学报, 2003, 58(3): 343-353.
FENG Jian. Spatial-temporal evolution of urban morphology and land use structure in Hangzhou [J]. Acta Geographica Sinica, 2003, 58(3): 343-353.
- [11] 柴立和, 周金峰. 复杂系统新理论——最大流原理及其数值实现[C]//中国工程热物理学会传热传质学术会议论文集. 南京: 中国工程热物理学会, 2006: 872-877.
CHAI L H, ZHOU J F. New theory of complex system-maximum flux principal and its numerical application[C]//Proceedings of the CSHMT Conference. CSET, Nanjing, 2006: 872-877.
- [12] 中国城市发展研究会. 中国城市年鉴 2004 [M]. 北京: 中国城市年鉴社, 2004.
China Research Society of Urban Development. The yearbook of China's cities 2004 [M]. Beijing: The Yearbook of China's Cities Press, 2004.
- [13] 韦海英, 柴立和. 基于最大流原理的湖泊系统富营养化新模型[J]. 科技导报, 2007, 25(2): 54-59.
WEI Haiying, CHAI Lihe. New eutrophication model for lakes based on Maximum Flux Principle [J]. Science & Technology Review, 2007, 25(2): 54-59.

(责任编辑 岳臣)

·封面文字说明·

世界上第一艘太阳能动力船横跨大西洋

2007 年 5 月 8 日, 瑞士一艘双体全太阳能动力船在成功完成横渡大西洋的航海计划后抵达美国纽约, 这是世界上第一艘不用一滴燃料仅仅依靠太阳能就实现穿越大西洋壮举的动力船。

2006 年 10 月中旬, 瑞士联邦总统米什琳·卡尔弥-瑞(Micheline Calmy-Rey)在巴塞尔将这只太阳能动力船命名为“太阳 21 号”(Sun 21), 她称赞此项计划为“未来机动交通的榜样”。而“太阳 21 号”也已经证明, 未来太阳能科技将会被运用到各个领域。

“太阳 21 号”由来自瑞士西部沃州(Waadt)伊韦尔东(Yverdon)的 MW-Line 有限公司负责制造。这只太阳能动力船主要由两艘快艇组成, 外形像一艘双体轻型帆船。船体主要由太阳能船舱、电池和电动机组成。船身長 14 m, 宽 6 m, 重达 12 t, 船体顶部覆盖了一块 60 m² 的太阳能电池采集板, 它可以在航海途中有效利用太阳能为船体的两台发动机提供能源, 一次完全充电可以连续航行 20 h, 速度可保持在 9~12 km/h, 与普通游艇的速度相当。即使在完全没有太阳的情况下, 根据设计要求, 这艘船仍然能够持续航行 18 h 而不会出现问题。

2006 年 10 月 16 日, “太阳 21 号”载着



包括巴塞尔的医生、环保主义者、历史学家以及来自巴塞尔大学的海洋生物学家在内的 5 名船员从瑞士巴塞尔的码头起航前往美国, 开始了首次跨越大西洋的旅程, 这是人类历史上首次驾驶完全不依赖任何燃料的机械化船只远渡重洋。

在离开巴塞尔后, “太阳 21 号”沿着莱茵河航行到荷兰的鹿特丹, 然后从那里驶往西班牙。2006 年 12 月 3 日, 这艘太阳能船开始了从西班牙的 Chipiona 向兰扎罗特(Lanzarote)的行程。在这段航行中, “太阳 21 号”曾遭遇了一场强大风暴, 当时风力达到

蒲福氏 (Beaufort) 7 级, 并伴有 5 m 高的海浪。出于安全考虑, “太阳 21 号”决定在摩洛哥的卡萨布兰卡进行短暂停留, 等风暴过后继续前进。2006 年 12 月 18 日, “太阳 21 号”驶达兰扎罗特, 至此横渡大西洋已经取得初步成功。

当航船抵达马提尼克时, “太阳 21 号”已经完全依靠太阳能航行了 7 000 km。在稍作休整后, 它继续沿海岸线、经佛罗里达继续驶向纽约, 2007 年 5 月 8 日, 在曼哈顿波光粼粼的海面上, “太阳 21 号”缓缓驶入纽约北科夫码头。

“太阳 21 号”这次横穿大西洋的航程共计行程 1.3 万 km, 途中共生产了 2 000 kWh 的太阳能。“太阳 21 号”的成功到达为环保节能开创了新纪元, 也让替代性能源的使用前景充满更多的可能性。

“太阳 21 号”的抵达恰好与联合国公布气候报告在同一天, 其报告呼吁人们尽量利用环保能源。船员 Martin Vosseler 因此说: “我们正想表达一个强烈的信息: 太阳能时代到来了!”

本期封面图片为“太阳 21 号”驶进纽约港口时的情景, 由新华社提供。

(本刊记者 冯峰)