第12卷 第5期 化学物理学报 Vol. 12, No. 5
1999年 10月 CHINESE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Oct. 1999

谢尔宾斯基地毯上自组织行为的研究*

侯中怀 杨灵法 辛厚文**
(中国科技大学化学物理系 合肥 230026)

摘 要 利用描述可激发介质中波的传播的二维反应扩散方程，首次研究了一类规则分形网络：谢尔宾斯基地毯(SG)上斑图(pattern)的形成。随着控制参量的变化，SG上可以有湍流、螺旋波，以及辫状波等多种形式的斑图；与规则体系比较，分形体系的受限扩散使得复杂斑图的形成受到抑制。在合适的控制参量区内，还发现存在"结构诱导"的脉冲波的周期激发现象以及辫状波向螺旋波、湍流的跃迁。

关键词 谢尔宾斯基地毯 自组织行为 斑图

1 引 言

分形，作为描述复杂对象的一种几何语言，近20年来受到了极大的关注。同混沌、孤子一道，分形已成为非线性科学的一个重要分支。自然界中许多事物都可以用分形加以描述，从天上的云团、海岸线到受限扩散生长的晶体、胶体等；许多化学反应的界面，如催化剂的表面，因为其复杂的多孔结构，也往往需要用分形来描述。正是由于分形的普遍存在，研究分形结构对其上发生的物理、化学过程的动力学行为的影响显得十分重要。最近已有研究工作探索了分形结构对一氧化碳(CO)催化氧化过程中的非线性动力学行为的影响。但对于分形结构上时空自组织行为，即斑图(pattern)的形成过程的研究，至今尚无文献报导。

远离平衡体系时空自组织行为的研究近年来已受到越来越广泛的重视。特别是在化学[1]和生命[2, 3]体系中，已观测到各种形式的斑图，包括湍流、螺旋波、脉冲波以及孤波等。这些斑图的形成可用反应扩散方程来描述[4]:

$$\frac{\partial u}{\partial t}=f(u,\ v)+D_u\nabla^2 u \tag{1}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}=g(u,\ v)+D_v\nabla^2 v \tag{2}$$

其中，u 和 v 分别为"激发"和"恢复"变量；D_u 和 D_v 为它们的扩散系数；$f(u,\ v)$ 和 $g(u,\ v)$ 描述了特定体系的动力学特征。通常情况下，$f(u,\ v)$ 的零解曲线，即 $f(u,\ v)=0$，呈N形，而 $g(u,\ v)$ 的零解曲线是单调的，且和 $f(u,\ v)$ 的零解曲线交于一点，该点是一个可激发的稳定不动点。本文取 $f(u,\ v)=u(1-u)(u-u_{th}(v))$，$g(u,\ v)=u-v$，其中 $u_{th}(v)=(v+b)/a$，此时方程(1)的局域动

* 国家自然科学基金资助项目。

** 通讯联系人。

收稿日期：1998-03-06；修回日期：1998-10-06。

力学特征(不考虑扩散)如图 1 所示: 该体系有一个可激发的稳定不动点(0, 0); 当初始的 u 值小于 $u_{th}(v)$ 时, 它将直接向稳定点逼近; 但当 $u > u_{th}(v)$ 时, 在到达不动点之前, u 值要经历一激发过程。在此可以看到, 对固定的 a 值, b 的大小表征了可激发的程度: b 较小时, 有更多的 u 在到达不动点之前会经历一段激发过程, 体系更容易表现出复杂形式的斑图。在欧氏空间对对方程(1)进行数值模拟, 可以得到各种时空有序结构, 包括湍流、螺旋波、孤波、脉冲波等, 从而成功地解释了 BZ[5] 反应体系、CO 催化氧化[6-8]、NO 催化氧化[9, 10] 等体系中的时空动力学行为。

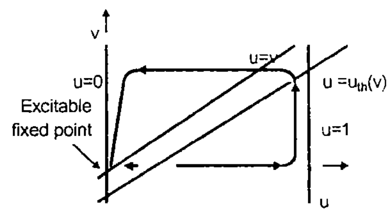


图 1　可激发介质的局域动力学特征

Fig. 1　Local dynamics of excitable media

近年来的研究表明, 斑图的形成不仅取决于体系的动力学特征, 而且介质的几何特征也有着重要的影响。一方面, 如果使介质上可激发区域和不可激发的缺陷呈一定形状的分布, 如 BZ 反应中在衬底上“预印”上一定形状花样的催化剂膜, 可以控制形成特定对称结构的斑图[11]; 另一方面, 介质中不可激发的缺陷区域的存在, 可以为螺旋波形成的钉扎中心: 当一列平面波列经过这些缺陷障碍时, 平面波会破裂成两段且各自绕断裂端点形成螺旋波[12]; 进一步的研究发现, 对随机分布的缺陷, 其密度对斑图的形成有较大影响: 当缺陷密度达到一定的临界值时, 不再能形成有序的结构。由此人们自然要问: 当可激发介质具有复杂或特殊的几何结构, 需要用分形来描述时, 其上形成的斑图会有哪些新的特征?基于这个出发点, 我们研究了一类确定性分形体系: 谢尔宾斯基地毯(SG)上的时空自组织行为, 以期对分形结构上的斑图特性进行初步的、定性的探索。

2　结　果

将单位正方形等分为 9 块, 抠去中心一块; 再依次对剩下的次级正方形重复同样的操作, 如此以至无穷便得到了 SG。SG 具有自相似的结构. 它的分形维 $D_f = \log 8/\log 3$。图 2 给出了一个嵌入在二维欧氏空间中的 4 阶 SG, 如果让每个最小的正方形单元对应于一个格点, 则我们将得到一个分形网络, 它对应于欧氏空间的 81×81 晶格, 其中有 8^4 个格点属于分形体。我们利用 Barkley 提供的快速算法[4], 在 SG 上对方程(1)进行了数值求解, 其差分格式的空间步长取为格点间最小间距的一半, 取零流边界条件。需要强调的是, 对数学上定义的分形体系上的反应扩散方程的求解至今仍非常困难, 原因是分形体系的无穷细微结构和处处不可微的性质, 甚至使得其上的拉普拉斯算符都难以定义。但由于实际中的分形体往往存在一定的标度区间, 其自相似结构也只体现在一定的尺度范围内(如图 2 所示的 SG), 对这种“物理”上的分形应用差分格式模拟求解还是可行的。在我

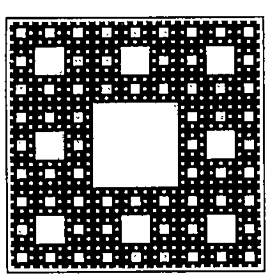
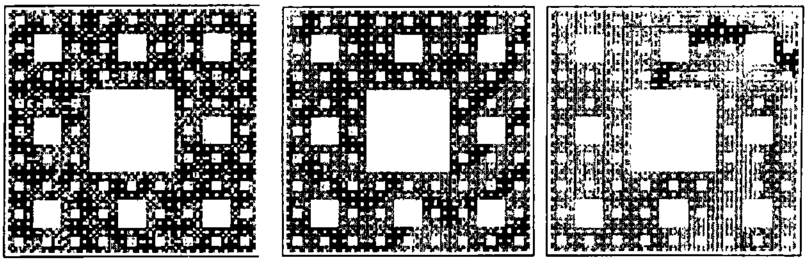


图 2　2 维 4 阶谢尔宾斯基地毯

Fig. 2　Sierpinski Gasket embedded in 2-dimensional Euclidean space

们的模拟过程中，SG上所有近邻数目小于4的格点都被视为边界点，因此分形的几何特征体现在边界条件的处理中。实际上，这种处理办法对其它的不规则分形都是适用的。

图3中，我们给出了SG上几种典型的斑图：湍流、螺旋波和辫状波。可以看到，尽管分形



(a) Turbulence ($b=0.005$)　(b) Spiral Waves ($b=0.015$)　(c) Braid－like wave ($b=0.05$)

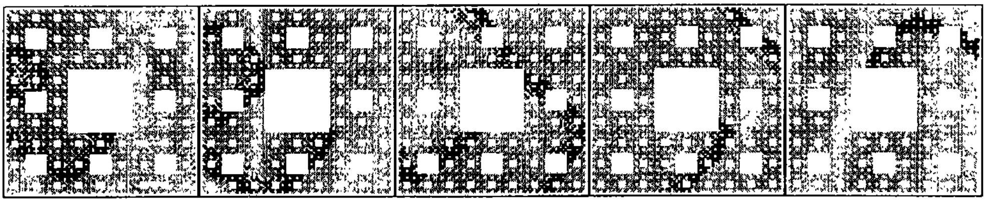
图3　SG上几种典型的斑图($a=0.8$, $\varepsilon=1/300$, $D_u=0.2$)

Fig. 3　Typical patterns observed in Sinpinski Gasket

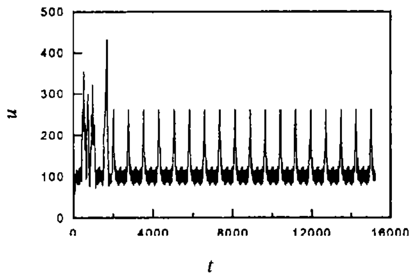
体系上有许多缺陷，但并不防碍波的传播。对于小的 b 值，可激发程度较大，波前经过缺陷后会分裂成两段，且各自形成螺旋波；由于分形体系上缺陷的分布呈多层次的自相似结构，可以想象，这许多不同层次的螺旋波的相互作用的结果便是一种复杂的斑图，类似于湍流的结构(图3a)。随着 b 的增大，虽然波前在遇到缺陷时会破裂，但越过缺陷后又会重新会聚到一起，从而形成波列的运动，这些波列的源泉是一个或多个螺旋波，它们的中心钉扎在缺陷的角部(图3b)。对更大的 b，小的缺陷不至于导致波的破裂，而波的特征尺度较小，又使得它既不能跨越最大缺陷，又不能钉扎于大缺陷的角部形成螺旋，从而导致了绕行最大缺陷的辫状波的出现(图3c)；下面我们将看到，这种辫状波有着可激发的特性。

当 b 位于形成螺旋波和辫状波的参数值之间时，我们发现存在一种有趣的周期激发碰撞现象。在辫状波绕行最大缺陷一段时间后，分形体的某个缺陷处会激发出一辐射状脉冲波，它逐渐扩展而至和辫状波相互碰撞：碰撞过后，辐射波湮灭而剩下辫状波继续绕行，直至再一次辐射波的激发。在合适的参数下，上述这种相互作用过程完全是周期的。图4a 描述了 $b=0.02$ 时辐射波的产生以及它和辫状波碰撞湮灭的过程；图4b 中给出了 u 值随时间的周期变化行为。若b取稍小一些的值，则这种激发碰撞过程不再是周期的，也不是稳定的；在进行若干次碰撞之后，体系将跃迁到螺旋波结构，甚至进一步跃迁到湍流状态。图4c 描述了 $b=0.0124$ 时 u 随时间的变化行为，可以清楚地看到跃迁过程的发生。

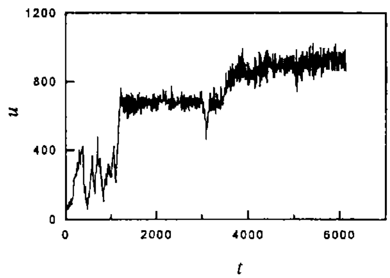
进一步研究后我们发现，上述的激发碰撞现象是一种“结构诱导”的行为。为了说明这一点，我们在图5中给出了同一个参数值下($b=0.02$)，不同阶数的SG上形成的斑图。在3阶的SG上，激发碰撞现象不再出现，绕行最大缺陷的辫状波也被两段互相垂直的平面波代替(图5a)。因此，虽然4阶SG上的最小缺陷并不能破坏规则时空结构的形成，但它对所形成的斑图的性质却有重要的影响：正是这些尺寸很小的缺陷的存在，诱发了辐射脉冲波的激发过程。从这个意义上来讲，辐射波的激发过程是一种结构诱导的效应。从图5中还可以看到，随着SG阶数的降低，体系上形成的斑图越来越复杂：由辫状波到螺旋波、湍流。因此，在规则体系上形成的湍流在存在层次缺陷的分形结构上受到有效的抑制。这种抑制作用应该来源于分形结构对



(a) The collision process



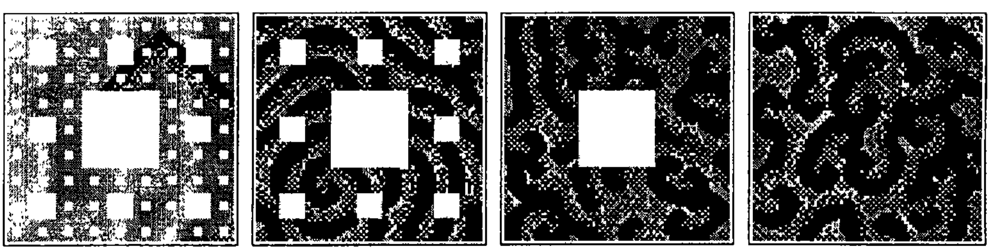
(b) The variation of u with time for (a), b=0.02



(c) The variation of u with time for b=0.0124

图 4　脉冲波的激发以及它和辫状波的碰撞

Fig. 4　Excitation of pulse wave and its collision with the braid-like wave



(a)　(b)　(c)　(d)

图 5　SG 的阶数对斑图形成的影响($b=0.02$)

Fig. 5　Influence of the stages of SG on pattern formation

扩散的限制，它抑制了近邻格点间信息的传递和斑图的形成。

3 讨 论

本文利用描述可激发介质中波动行为的反应扩散方程，从定性的角度研究了一类确定性分形体系：谢尔宾斯基地毯(SG)上的斑图的形成以及它们的性质。我们发现，尽管分形体系存在着许多不可激发的缺陷，但仍可以形成特定的时空有序结构：螺旋波、辫状波乃至湍流；但由于分形体系上缺陷的层次分布，扩散受到限制，从而螺旋波和湍流等复杂斑图结构的形成都受到相当程度的抑制。一种有趣的现象是，当控制参数 b 取合适的值时，我们观察到一种“结构诱导”的辐射波的周期激发，这种脉冲波与辫状波发生碰撞后湮灭，而生成新的辫状

波。这些表明，分形体系上的时空有序结构的形成可以有与规则晶格上相当不同的特征。

应该指出，本文的工作对探索分形体系上的时空动力学行为的特性仅仅是个开始。实际上，还有许多问题需要研究：其他分形体系，甚至是随机分形体系上，例如渗流网络、DLA 等，斑图的形成和性质有哪些新的特征？分形体系的特征参量，例如分形维、分形子维数等，同斑图的特征参数，例如螺旋波的色散关系、波长等有什么定量关系？等等。这些问题都将依赖于将来进一步的工作。

参 考 文 献

[1] Irving R Epstein, Kenneth Showalter. *J. Phys. Chem.*, 1996, **100**: 13132

[2] Davidenko J M, *et al.*. *Nature*, 1992, **225**: 535

[3] Winfree A T. *Science*, 1994, **266**: 1003

[4] Dwight Barkley. *Physica D*, 1991, **49**: 61

[5] Grill S, Zykov V S, Muller S C. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **75**: 3368

[6] Bar M, Gottschalk N, Eiswirth M, Ertl G. *J. Chem. Phys.*, 1994, **100**: 1202

[7] Graham M D, *et al.*. *Science*, 1994, **264**: 80

[8] Bar M, *et al.*. *J. Phys. Chem.*, 1996, **100**: 19106

[9] Gottschalk N, Mertens F, Bar M, Eisairth M, Ertl G. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **73**: 3483

[10] Mertens F, Imbihl R. *Nature*, 1994, **370**: 124

[11] Oliver Steinbock, Petteri Kettunen, Kenneth Showalter. *Science*, 1995, **269**: 1857

[12] Konstantin Agladze, James P Keener, Stefan C Muller, Alexander Panfilov. *Science*, 1994, **264**: 1746

The Study of Self−Organization Behavior on Sierpinski Gasket*

Hou Zhonghuai Yang Lingfa Xin Houwen**
(*Department of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, Hefei* 230026)

Abstract Up till now, there is no report on the study of self−organization behavior on fractal networks. However, pattern formation on fractal networks is of great theoretical and experimental importance, for so many things in the world, including catalyst surface, should be viewed as fractal, and abundant patterns, e.g., turbulence, spiral waves and soliton waves have been observed in these systems. Using the reaction diffusion equation which describes wave propagating in excitable media, and adopting the fast simulation method provided by Barkley, the authors studied the pattern formation behavior on a kind of deterministic fractal: Sierpinski Gasket (SG) with the variation of the control parameters, turbulence, spiral waves and braid−like waves are observed. One sees that the defects of SG cannot hinder the formation of regular patterns. Compared to Euclidean space, however, one finds that the fractal structure can suppress the formation of more complex structures, i.e., spiral waves or turbulence, which should result from the limitation of diffusion on fractal networks. It's rather interesting that under certain parameter, a periodic excitation of pulse wave is observed, which collides with the braid−like wave and then disappears. One should note that this phenomena is purely "structure induced". As a whole, this is the first report of the study on pattern formation in fractal media and it is demonstrated that fractal structure can lead to some new features which may calls the attention of scientists.

Keywords Sierpinski Gasket Self−organization Pattern forlmation

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China.

** To whom correspondence should be addressed.