复杂性科学中的突变理论

陈关荣
（香港城市大学）

从中文语义上来说，“突变”表示突然变化，比如“涌现”，是个没有争议的描述性词语。但是，“突变理论”这个专有名词是从英文术语“Catastrophe Theory”翻译过来的，从英文语义上来说是“灾变理论”，有“灾害性”的含义，并不为一些学者接受。基于对其数学理论的不同理解、诠释和评价，这一理论自从上世纪八十年代提出来之后，在学术界引起过一场异常激烈的讨论和争辩。

本文把主题术语翻译并理解为突变而不是灾变，旨在介绍和解释它的复杂性科学内涵，并不打算介入那场至今依然存在的学术争论之中。

【一】突变现象

在复杂性科学研究中，混沌理论关注并刻画一个动力系统的状态在演化过程中的起点和终点，即对初始条件的极端敏感性和长时间系统状态的不可预测性，而突变理论则关注并刻画一个动力系统的状态在演化过程之中的性质突变和奇异性，如系统稳定性的突然变化和新动力行为的突然出现或消失。

复杂的自然界和人类社会活动中经常出现各种各样的“突变”现象，例如平静的水在零度时突然结冰，寂静的冰川突然轰隆崩塌，正常运作的股票市场突然崩盘，灯火通明的大厦因故障断电突然漆黑一团，一个安静的人受到某种刺激突然情绪失控。这些在物理学中被称为“相变”的现象有一个共同点，就是本来一个渐变的、连续的状态演化过程，在瞬间产生一个跳变的、不连续的结果。对于这类突变现象，经典微积分中描述变化率的求导数运算不能直接应用，因为它只能用于描述连续平滑的状态或运动变化。

突变理论是太阳系起源的假说之一。该理论认为太阳系的形成源于突发性天文灾难事件，通常称为灾变。十八世纪法国博物学家、作家乔治-路易·德·布丰（Georges-Louis Leclerc de Buffon，1707 年-1788 年）在 1745 年提出恒星相互碰撞假说，认为一颗大彗星掠碰太阳使它自转起来并带动了一批行星和卫星。1900 年，美国地质学家汤姆斯·张伯伦（Thomas C. Chamberlin,1843 年-1928 年）提出太阳系形成的突发“星子说”。后来，他同美国天文学家福里斯特·莫尔顿（Forest Ray Moulton，1872 年-1952 年）合作，提出另一种假说：一颗恒星靠近太阳时，在太阳的正反两面掀起巨大的沙石浪潮，其引力剥离太阳表面的物质并让它们聚合成一批新的行星和卫星。

地球也曾经发生许多短暂的巨大灾难，其中有些是全球性的，像《圣经》中描述的大洪水。19 世纪初，法国动物学家、地质学家乔治·居维叶（Georges Cuvier，1769 年-1832 年）建立了灭绝物种的概念，认为地球上的绝大多数物种灭绝是突然、迅速和灾

难性的。他是比较解剖学和古生物学奠基人，他的学说为生物突变进化论提供了一种有代表性的科学观点和理论根据。20 世纪 70 年代，灾变理论一度复兴，成为科学研究和讨论的热点。那时，灾变理论被试图用来解释和描述地球上曾经发生的一些生物集群如恐龙灭绝甚至月球的形成等一系列重大地质和天文事件。当然，科学家们说话有理有据：1980 年，由美国实验物理学家、诺贝尔奖得主路易斯·阿尔瓦雷兹（Luis Alvarez）和他的地质学家儿子沃尔特（Walter Alvarez）领导的团队，在约 6600 万年前的白垩纪-古近纪地层界限的黏土层中发现了全球性的铱元素异常。铱在地壳中极其稀有，但在小行星和彗星中却含量丰富。据此，他们提出了“小行星撞击说”：一颗直径约 10 公里的小行星撞击地球，引发了全球性的巨大海啸和森林火灾，并将大量尘埃抛入大气层，遮蔽阳光长达数年之久，导致植被光合作用停止、全球变冷、食物链崩溃，最终造成了包括恐龙在内的全球四分之三以上的物种大灭绝。1990 年代，在墨西哥的尤卡坦半岛（Yucatán Peninsula）上，人们发现了一个由小行星撞击生成的奇克苏鲁布陨石坑（Chicxulub Crater），其年龄与上述灭绝事件完全吻合，从而为灾变理论提供了决定性的证据。地球灾变论还认为，在太阳系形成初期，一个大约火星大小的天体忒伊亚（Theia）以倾斜的角度撞击了原始地球。那次灾难性的碰撞将地球的一部分地幔物质抛入太空，而这些碎片在地球轨道上逐渐互相吸积融合，最终形成了月球。

突变理论研究的重要性是不言而喻的。了解突变发生的原因和机理，可以帮助对自然灾害和社会事件的发生做出预报、预警和预防，也可以帮助加强设施结构和社会组织的韧性。

【二】突变数学理论

研究突变理论，科学家们依赖并借助于物理学和数学。

“突变理论”或者称为“灾变理论”这个名词是英国几何拓扑学家克里斯托弗·齐曼爵士（Sir Erik Christopher Zeeman，1925 年-2016 年）在推广法国拓扑学家雷内·托姆（Rene Thom，1923 年-2002 年）建立的相关数学理论时建议的。他于 1976 年在《科学美国人》杂志上以“灾变理论”（“Catastrophe Theory”）为题写了一篇内容丰富详尽的科普作品。其中，他用一条狗的情绪突变的条件和过程作为例子来通俗地解释灾变理论，还介绍了自己设计的一个“灾变机器”，即一个简单的机械结构会在平静运动过程中突然发生剧烈振动。托姆是著名拓朴学家，1958 年因微分拓朴学开创性工作获菲尔兹奖。1972 年，托姆发表了一本极具影响的著作《结构稳定性和形态发生学》（Structural Stability and Morphogenesis）。这是一本不带严格数学公式和详细证明的科普书，概述了他关于突变理论的主要思想和分析方法，充满哲理思辨。

突变理论是关于非线性系统动力学的分岔理论（bifurcation theory）和奇点理论（singularity theory）的数学分支，研究复杂非线性系统在微小参数变化下如何突然产生运动学和动力学行为中的剧烈变化。托姆的核心观点是：系统的突变并不是无迹可寻的，它在本质上遵循某些数学规律，而突变理论的研究，就是去弄清楚复杂系统在其关键参数不断变化时如何突然发生巨大行为变化的规律。

下面简单介绍突变的数学理论。为此，从动力系统的分岔理论谈起。

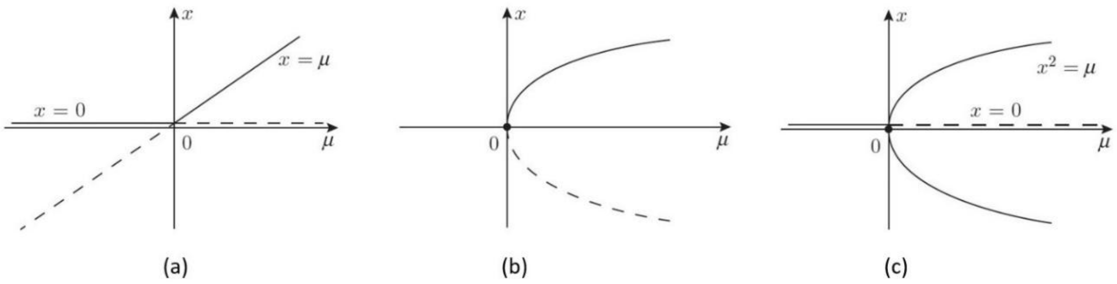

图 1 三种基本分岔

先来看看最简单也是最基本的分岔动力学。

（1）跨临界分岔（transcritical bifurcation）

考虑一维二次方程 $\dot{x} = \mu x - x^2$，其中 μ 是参数。这个系统有两个平衡点：$x^* = 0$ 和 $x^* = \mu$。随着参数 μ 在零点附近变化，平衡点的稳定性会突然发生变化，如图 1(a) 所示：从稳定（实线）变成不稳定（虚线），或者反过来，从不稳定变成稳定。

（2）鞍点分岔（saddle-node bifurcation）

考虑一维二次方程 $\dot{x} = \mu - x^2$，其中 μ 是参数。这个系统有一个平衡点 $(x^*, \mu) = (0,0)$ 和一条平衡曲线 $(x^*)^2 = \mu$。随着参数 μ 在零点附近变化，平衡线的稳定性会突然发生变化，如图 1(b)所示：一个分支是稳定的（实线）而另一个分支是不稳定的（虚线）。

（3）叉型分岔（pitchfork bifurcation）

考虑一维三次方程 $\dot{x} = \mu x - x^3$，其中 μ 是参数。这个系统有两条平衡曲线：$x^* = 0$，μ 任意，和 $(\mathrm{x}^*)^2 = \mu$。随着参数 μ 在零点附近变化，第一条平衡线的稳定性会突然发生变化，如图 1(c)所示：从稳定（实线）变成不稳定（虚线），或者反过来，从不稳定变成稳定。

（4）霍普夫分岔（Hopf bifurcation）

考虑一个二维系统：$\dot{x} = f(x, y; \mu)$，$\dot{y} = g(x, y; \mu)$，其中 μ 是参数，f 和 g 是可微函数。假定这个系统有平衡点 $(x^*, y^*) = (0,0)$。如果随着参数 μ 在某个特定数值附近作微小变化时，系统在平衡点上的雅可比矩阵有一对共轭复特征根并且其实部会作相应移动、垂直地横跨过复平面的虚轴，那么在特征根跨越的瞬间，系统会突然从无到有地产生一个环绕平衡点的周期轨道（称为极限环）。

上面介绍的是几个经典的、描述系统典型动力学特性（主要是稳定性）突然变化的基本数学理论。但是，这些突然变化都是连续性的，并不出现断裂和跳跃。

托姆把分岔理论和奇点理论结合起来，考虑更为复杂、更为隐蔽也更为深刻的不连续突变现象。

作为例子，我们考虑一个具有势能函数 $\mathrm{H}=x^4+ax^2+bx$ 的动力系统，其中 a 和 b 是参数。当 $a<0$ 时，势能 H 有两个极值，一个稳定，一个不稳定。如果参数 a 缓慢地增大，系统状态轨线可以趋向于稳定的最小极值点。但在 $a=0$ 时，稳定极值点和不稳定极值点相遇并同时湮灭，这是一个不连续的分岔点。当 $a>0$ 时，系统的稳定解消失，这也是一个不连续的分岔。因此，如果一个物理系统经历这样一次双重分岔，那么当 a 到达 0 时，$a<0$ 的解的稳定性会突然消失，系统会突然产生一种全新的、截然不同的动力学现象。这是一种不连续的突变，和上面介绍的经典的分岔现象有着本质上的区别。这个例子可以通过图 2 来理解。在参数投影平面，除了分岔尖点（cusp）轨迹之外，对应于每个点 (a,b)，变量 x 只有一个极值。但在尖点轨迹上的点 (a,b)，变量 x 有两个不同的极值，如图 2 的上图所示。

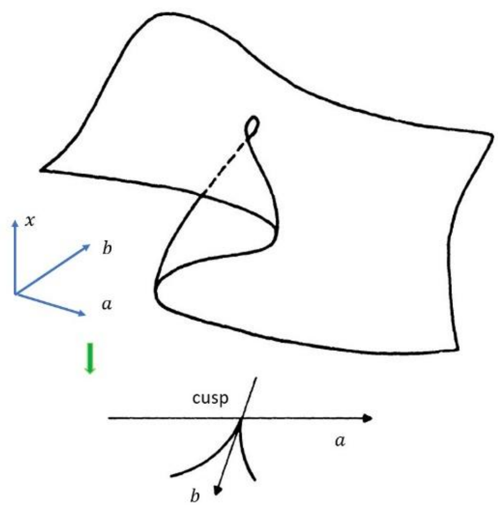

图 2 尖点型分岔

通过控制参数，托姆以及齐曼等人把系统分为四种类型，并在此基础上建立了一条重要的“突变分类定理”。该定理指出：一个系统中所有稳定性的不连续变化现象，都可以归类为七种“基本突变类型”之一：折叠型（fold）突变、尖点型（cusp）突变、燕尾型（swallowtail）突变、蝴蝶型（butterfly）突变、椭圆型（elliptic）突变、双曲线型（hyperbolic）突变和抛物线型（parabolic）突变。该定理为那些由于控制参数的连续变化而表现出突然、断裂和跳跃行为变化的动力系统提供了一种数学模型分类。

作为例子，众所周知的沙堆崩塌便是一种折叠型突变：把沙粒一颗一颗地加到一堆小沙丘上。开始时，沙堆是稳定的。但堆得越高，崩塌的风险就越大。当到达了某个临界状态之后，再加上一颗沙粒，整个沙堆便会突然塌陷。加上最后一颗沙粒的时刻和位置也称为（时空）“引爆点”（tipping point）。这个引爆点的概念是突变可能性的核心和关键。

【三】突变论的应用

突变理论大有用武之地，首先是数学。突变理论企图解决的一个重要数学问题，是在哪里截断系统势能函数的泰勒级数展开式是安全的？所谓安全，是指截断后的有限项的级数能够在级数展开处的邻域内保存原级数的主要拓朴性质，即使原级数是发散的。这一问题的解答在大规模动力系统降维建模中非常关键。

最早正面评价突变理论的物理学家包括英国理论物理学家迈克尔·贝里（Michael Berry，1941-）和物理及冰川学家约翰·奈（John Nye，1923-2019）。他们介绍了突变现象在光学理论及实验方面的研究工作，首创了“灾变光学”这一称谓。

俄罗斯裔比利时籍的美国化学家伊利亚·普里戈津（Ilya R. Prigogine，1917-2003）是 1977 年诺贝尔化学奖获得者。他的耗散结构理论为突变理论提供了支持：当一个系统远离平衡态时，通过“负熵流”机制，可让新的形态发生成为可能。例如，实验室中的“活性液滴”现象演绎了大量分子从个体无序到宏观有序的涌现。

此外，突变理论在气候学和生态学中找到很好的应用。例如，它被用来预测亚马逊雨林退化、珊瑚礁白化、北极冰盖消融、大西洋径向翻转环流（AMOC）崩溃，等等。

在系统生物学、医学和神经科学领域里，突变理论被用于研究新陈代谢如何发生和转化、一个干细胞如何突然分化成特定类型的细胞如神经元或肌肉细胞、正常细胞如何突然转化为癌细胞以及如何确定癌细胞的恶性转移路径、复杂疾病如心梗和脑梗突发如何发生，还有心理学中的精神崩溃和顿悟以及人在认知及决策过程中为何会突然做出一个重大决定，等等。

在网络科学中，突变理论被用于研究级联失效，如金融网络瘫痪、电网崩溃、互联网断网事故，等等。甚至在数据科学与机器学习领域中，拓朴数据分析里的计算几何学以及深度学习中损失函数的“尖点”几何结构等等，也都纷纷开始和突变理论联手。

【四】结语

本文介绍的内容属于“初等”突变理论，侧重于对不连续现象进行识别和分类，而现代科学研究更关注预警信号的探测以及高维系统和非平衡系统的各种动力学相变。更广义、更复杂的突变理论仍在发展进程中。尽管前面提及的突变理论的应用前景颇为令人鼓舞，目前真正的应用尚处于开发阶段，至今没有几个特别成功的实证例子。因此，前面提到的关于对突变理论的历史争论确实不是无风起浪。本文写了许多正面的内容和评价，但反面意见也相当强烈。作为对中间立场意见的介绍，我愿意引用老朋友马丁·戈卢比茨基（Martin Golubitsky，1945-）1978 年在 SIAM Review 杂志上发表的一篇综述里的一句评论：

> “关于突变理论的评论五花八门，从‘第一个解释参数连续变化如何导致不连续现象的理论’或‘研究生物学和社会科学中定性问题所必需的数学类型’，

到‘一些不错的观察结果被完全没有根据的推测所覆盖’。不过，如通常那样，真相介乎于这两者之间。”