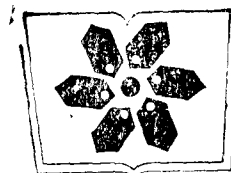


陈兰荪  
陈键著

# 非线性生物动力系统

科学出版社



中国科学院科学出版基金资助项目

# 非线性生物动力系统

陈兰荪 陈 键 著

科学出版社

1993

(京)新登字 092 号

### 内 容 简 介

非线性生物动力系统是生物数学的一个重要分支,是应用动力学方法研究生命科学的新兴边缘性学科,是使生命科学从定性研究过渡到定量研究的有效方法,是进一步揭示生命科学复杂性的有力工具。本书介绍生命学科量化研究中建立动力学数学模型的一些方法,以及这些数学模型的分析研究方法和国内外最新研究情况,并提出进一步研究的问题和方向。涉及的问题有:化学与生物化学反应动力学,种群动力学,传染病流行趋势分析,微生物的连续培养,生态系统进化论与种群遗传学等。

本书可供生物学、医药学、农、林科学以及应用数学、生物数学的研究工作者和大专院校有关专业的师生参考,也可作为相关学科的研究生教材。

## 非 线 性 生 物 动 力 系 统

陈兰荪 陈 键 著

责任编辑 王爱琳

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

中 国 科 学 院 印 刷 厂 印 刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

\*

1993年10月第 一 版 开本:787×1092 1/16

1993年10月第一次印刷 印张:14 1/2

印数:1—1000 字数:335 000

ISBN 7-03-003465-1/Q·442

定价:13.20 元



## 前 言

非线性生物动力系统是生物数学的一个重要分支学科。生物数学从方法论的角度来看,有三个重要的分支学科:生物统计、生物动力系统和生物控制论,而每一个分支学科又深入生命科学的许多个领域。生物数学的理论与方法,已经为现代生命科学许多领域的发展作出了巨大的贡献。

生命科学只停留在定性的研究水平是不够的。从定性研究发展到定量的研究,是科学发展的必然规律。一门学科只有当它充分利用数学工具时才算发展到了比较完善的阶段。在本世纪初人们意识到,生物科学的发展必须借助于数学工具。他们利用数学的方法来处理大量的实验数据,从中得到生物学的规律。因此生物统计学首先得到了发展,在本世纪初“生物统计”就作为一个独立学科而出现了。但是,“生物动力系统”作为一个学科,还是70年代中后期才形成的。在20年代初, Lotka 和 Volterra 几乎是同时分别把动力学的方法用在分子化学反应系统和海洋渔业生态系统,引起了人们的注意。在物理学、力学中人们已熟知的动力学方法,第一次在研究生命科学中得到了应用。此后,人们逐步发现,在生命科学中有许多的现象是符合动力学规律的,例如生物分子、细胞的相互作用,以及细胞的生长规律,都可以用动力学的方法来描述——细胞动力学;分子之间的化学反应的动力学规律——化学反应动力学;生态学中种群与环境的相互作用,种群与种群的相互作用的动力学规律——种群动力学,乃至微生物培养技术、种群遗传基因频率的变化、生物进化论的规律、人类神经网络等都可以用动力学的方法来描述,并且种群、细胞的某些行为科学,例如传染病的流行等,利用动力学的方法也得到了很有说服力的结论。

生命现象远比物理、力学现象要复杂得多。动力学方法从物理学、力学到生命科学,一方面是得到了很好的应用,一方面也在研究生命科学中得到了发展。特别是从本世纪70年代后期开始,该学科得到迅速发展,它几乎深入到生命科学的每一个分支,从微观到宏观,出现了许多推动生命科学发展的工作。本书就其中发展比较成熟、应用比较普遍的几个问题,向读者介绍这方面的基础内容和方法,特别是如何建立数学模型,以及如何对所建的数学模型作深入的数学分析研究,最后由数学分析研究得到生命科学问题的结论。

用动力学方法来探讨生命科学规律的著作,近10年来也逐渐出现,如参考文献[1—6]所列。作者希望通过这个小册子能勾通生物学家和数学家之间的共同语言,以达到研究上的合作。其中所用到的数学方法,不能在此书中一一介绍,已列在参考文献中便于读者查找。

本书曾作为讲义,先后在四川大学等多所大学为研究生、青年教师作为选修课教材。在开课期间,许多同志提出了宝贵的意见。在本书完稿过程中,得到了马知恩、刘平舟、李华、吴培霖、桂占吉等同志的热心帮助,他们或则提出某问题的撰写方案,或则帮助起草某

个问题的内容,或则指出原讲义中的某些缺点错误。作者对此一并表示感谢。

### 参 考 文 献

- [1] Edelstein-Keshet, L., *Mathematical Models in Biology*, Random House, 1988.
- [2] Ромеовский, Ю. М., Степанова, Н. В., Чернавский, Д. С., *Математическая Биофизика*, Москва, 1984.
- [3] Segel, L. A., *Modeling Dynamic Phenomena in Molecular and Cellular Biology*, Cambridge University Press, 1984.
- [4] Hoppensteadt, F. C., *Nonlinear Oscillations in Biology*, American Mathematical Society, 1979.
- [5] DeAngelis, D. L., Post, W. M., Travis, C. C., *Positive Feedback in Natural Systems*, Springer-Verlag, 1987.
- [6] 陈兰荪, *生物数学引论*, 科学出版社, 1988.

# 目 录

## 前言

<b>第一章 化学反应动力学中的非线性振荡</b> .....	1
一、 正比反应速度的反应模型与耗散结构.....	1
二、 Belousov-Zhabotinskii 反应.....	17
三、 温度振荡.....	30
四、 酶促反应的化学动力学模型.....	32
<b>第二章 非线性种群动力学系统</b> .....	53
一、 单种群模型与连续递代.....	53
二、 两种群相互作用数学模型的极限环.....	60
三、 三种群 Lotka-Volterra 模型的全局稳定性、空间周期解与混沌结构.....	69
四、 复杂生态系统的持续生存理论.....	77
五、 时变环境生态系统的稳定性.....	90
六、 环境污染对生物种群持续生存的影响.....	103
<b>第三章 传染病动力学模型的阈值理论</b> .....	111
一、 Kermack-Mckendrick 模型的阈值理论.....	111
二、 具有种群动力的 Kermack-Mckendrick 模型.....	119
三、 非线性传染力的传染病模型和传染病的周期现象.....	124
四、 非正比移除率传染病模型的稳定性.....	138
五、 离散时间传染病模型的建立与稳定性.....	151
六、 疟疾病与艾滋病的数学模型.....	155
<b>第四章 微生物种群的连续培养</b> .....	163
一、 微生物的一次性培养.....	164
二、 微生物的连续培养.....	165
三、 多种微生物混合培养.....	170
四、 食物链培养法.....	183
五、 非单链的食物链培养模型.....	191
<b>第五章 生态系统进化论与种群遗传学的数学模型</b> .....	198
一、 生态系统进化论.....	198
二、 种群遗传学中的确定性数学模型和 Hardy-Weinberg 平衡原理.....	200
三、 自然选择对基因频率变化的影响.....	203
四、 捕食行为对生态系统进化的影响.....	215

# 第一章 化学反应动力学中的非线性振荡

在历史上最早报道均匀溶液中的周期化学反应是由碘酸-碘氧化偶联催化的过氧化氢的分解<sup>[1]</sup>,最早利用数学模型预言持续振荡的是 Lotka 模型<sup>[2]</sup>,但当时化学振荡被当作罕见的事例,甚至被当作是玩弄技巧的事,没有引起人们的重视.自从 60 年代初期以来,由于在生物化学反应中发现持续振荡,并且它们已经变成实验研究的一个重要部分.同时为了说明诸如生态学、化学反应器的功能以及生物学各种不同领域内的周期振荡现象,数学模型的方法越来越引起人们的重视,例如 Lotka 模型、Brussel 振子、Belousov-Zhabotinskii 反应等.在这章中我们将详细介绍这一类研究,为此我们将从最基本的建模方法入手.

## 一、正比反应速度的反应模型与耗散结构

最简单的化学反应是反应物  $A$  形成产物  $B$  的单分子反应,记为



根据  $A$  和  $B$  的物理或化学性质的不同,可以在反应不同时间测定在反应器内  $A$  浓度的减少或  $B$  浓度的增加,从而计算反应速度.图 1.1 表示反应物  $A$  的浓度,记为  $[A]$ ,是反应时间  $t$  的函数.在任何一瞬时,化学反应的速度  $(-d[A]/dt)$  是图 1.1 反应曲线相当于该时间点上的切线的斜率,此斜率(反应速度)随着  $[A]$  的减少而降低,近似地可视为反应速度与  $A$  的浓度成正比,因此反应过程中的  $[A]$  满足微分方程

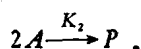
$$d[A]/dt = -K_1[A], \quad (1-1)$$

这就是一级反应的数学模型,是一个最简单的数学模型.只要给定初始浓度  $[A(0)]$  即可按下式求得任一时刻  $t$  时的浓度  $[A(t)]$ :

$$\ln([A(0)]/[A(t)]) = K_1 t, \quad (1-2)$$

这里比例常数  $K_1$  就称为反应速度常数.

对于一个需要两个分子反应物  $A$  形成一分子产物  $P$  (或其他两分子产物)的反应,我们称为二级反应,记为



我们假设这种双分子反应的反应速度与反应物  $A$  当时的浓度的平方成正比,也就是说这个反应的数学模型为

$$-d[A]/dt = K_2[A]^2, \quad (1-3)$$

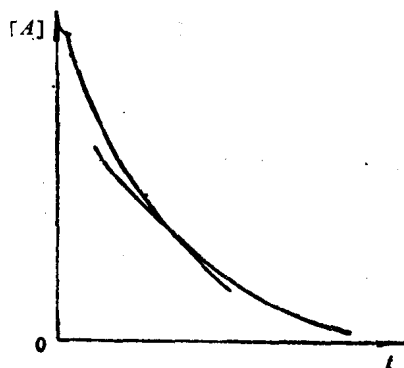
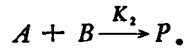


图 1.1

对两个不同的分子  $A, B$  互相作用反应而形成产物  $P$ , 即反应



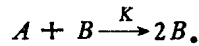
与上同样, 我们假设这种双分子反应的反应速度与反应物  $A$  的浓度和反应物  $B$  的浓度乘积成正比, 即这反应的数学模型为

$$d[A]/dt = -K_2[A][B]. \quad (1-4)$$

如果两个反应物中, 反应物  $B$  的浓度相对  $A$  来说要大得多,  $B$  的浓度在反应过程中下降极少, 几乎保持恒定, 此时反应速度只和  $A$  的浓度成正比, 实验结果将服从一级反应的模型, 称为是假一级反应, 模型也写成

$$d[A]/dt = -K_0[A]. \quad (1-5)$$

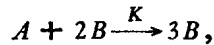
两分子反应中的一个重要类型是自催化反应,



其浓度变化为

$$-d[A]/dt = d[B]/dt = K[A][B], \quad (1-6)$$

类似的有三分子自催化反应



浓度变化方程为

$$-d[A]/dt = d[B]/dt = K[A][B]^2. \quad (1-7)$$

以上(1-1)~(1-7)反应数学模型, 是由实验的数据所得到的近似模型, 我们也可以利用数学的理论对上面所述的模型作进一步的理解。

例如一级反应:

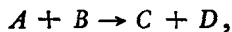


从一般的常识知道由  $A$  反应变成  $B$  的反应速度应与当时  $A$  的浓度  $[A(t)]$  有关, 用数学模型来描述, 可以写为

$$d[A]/dt = F([A]).$$

其中函数  $F$  仅只表示一种关系。对于具体的化学反应, 我们可以通过实验求出  $F$  的近似形式, 从数学的角度来说, 如果  $A$  的浓度不大时我们可以用  $F$  的线性化来近似地代替  $F$ , 即  $F \doteq F(0) + K[A]$ 。我们注意到, 当  $A$  的浓度为零时此反应不会发生, 因此  $F(0) = 0$ 。又, 反应必然使  $A$  的浓度逐渐下降, 因此  $F([A]) \doteq -K_1[A]$ , 这就是模型 (1-1)。从这个数学的推理, 使我们清楚模型 (1-1) 仅当  $A$  的浓度不大时才适用。

同样的数学推理对于二级反应



$$d[A]/dt = d[B]/dt = F([A], [B]) \doteq -K[A][B].$$

这里  $F$  的幂级数展式取到二次项, 但由于明显的道理, 反应中缺少任何一反应物  $A$  (或  $B$ ) 反应均不可能进行 ( $d[A]/dt = d[B]/dt = 0$ ), 所以

$$F(0, 0) \doteq F(0, [B]) \doteq F([A], 0) \doteq 0,$$

又, 反应使  $A$  和  $B$  的浓度下降, 因此  $F([A], [B]) \doteq -K[A][B]$ , 类似这样的推理可以应用到三分子反应





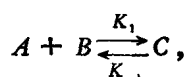
$$\begin{aligned}
d[A]/dt &= d[B]/dt = d[C]/dt \\
&= F([A],[B],[C]) = -K[A][B][C], \\
2A + B &\rightarrow A + 2C, \\
d[A]/dt &= d[B]/dt = -K[A]^2[B], \\
pA + qB &\rightarrow (p+q)B, \\
d[A]/dt &= -pK[A]^p[B]^q.
\end{aligned}$$

以上所述是基本建模方法,这种利用取最低次项法则所建立的反应模型我们都称之为正比反应速度的反应模型,下面就几类重要的反应模型作详细的介绍。

## 1. 两分子反应模型

例 1.1 两分子加合反应封闭系统。

假设分子  $A, B$  和  $C$  在时刻  $t$  的浓度为  $A(t), B(t)$  和  $C(t)$ 。加合反应机制为



是可逆反应,按上面所述建模基本法则有数学模型

$$\begin{aligned}
dA/dt &= -K_1AB + K_{-1}C, \\
dB/dt &= -K_1AB + K_{-1}C, \\
dC/dt &= K_1AB - K_{-1}C.
\end{aligned} \tag{1-8}$$

这里  $K_1$  是由  $A+B$  反应生成  $C$  的二级反应速度常数,  $K_{-1}$  是上述反应的逆反应,即由  $C$  分解成  $A$  和  $B$  的一级反应速度常数。我们假定反应开始时,也即  $t=0$  时  $A, B$  和  $C$  的浓度为:

$$A(0) = A_0, B(0) = B_0, C(0) = C_0.$$

由(1-8)可知  $d(A+C)/dt = d(B+C)/dt = 0$ , 因此

$$A(t) = A_0 + C_0 - C(t), B(t) = B_0 + C_0 - C(t).$$

由(1-8)我们有:

$$\begin{aligned}
dC/dt &= K_1[A_0 + C_0 - C(t)][B_0 + C_0 - C(t)] - K_{-1}C \\
&= K_1(\alpha - C(t))(\beta - C(t)) - K_{-1}C
\end{aligned} \tag{1-9}$$

其中  $\alpha = A_0 + C_0, \beta = B_0 + C_0$ , 我们不难求出(1-9)满足初始条件  $C(0) = C_0$  的解。由解我们可以知道,任何时刻在反应器中分子  $C$  的浓度,随即也就知道任何时刻在反应器中分子  $A$  和  $B$  的浓度,但是有时我们的问题不在于了解在每一时刻三种分子的浓度,而在于了解这个化学反应的趋势,也就是说在给定的初始浓度后,要知道这个反应是否会达到某一平衡态,由(1-9)式可知,存在两个正平衡态  $C_1$  和  $C_2$ ,

$$C_{1,2} = \frac{\alpha + \beta + K \pm \sqrt{(\alpha + \beta + K)^2 - 4\alpha\beta}}{2}, K = \frac{K_{-1}}{K_1} \tag{1-10}$$

容易用线性化的方法知道,若  $C_1 > C_2$  则平衡态  $C_2$  是稳定的,  $C_1$  是不稳定的。由图 1.2 可知,只要  $C_0 < C_1$ , 则由  $C(0) = C_0$  初值出发的解,当  $t \rightarrow \infty$  时必有  $C(t) \rightarrow C_2$ , 反应将达到平衡。由于(1-10)必有  $C_1 > C_0$ , 所以对于所有初始值  $C_0$ , 反应将达到平衡,产物的浓度终将保持在  $C_2$  附近。我们可以用同样的方法得到分子  $A$  和  $B$  在反应时其浓度的平衡态,例如  $A_0 = 1, B_0 = 1, C_0 = 0$ , 而且  $K_1 = 1, K_{-1} = 1$ , 即有  $K = 1$ ,

则反应后  $C$  的浓度将稳定在  $(3 - \sqrt{2})/2$  附近。

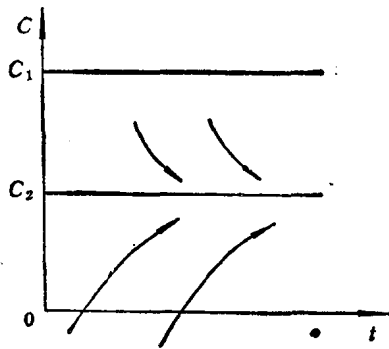
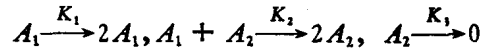


图 1.2

### 例 1.2 两分子反应开系统 Lotka 模型

假设分子  $A_1$  和分子  $A_2$  在时刻  $t$  的浓度记为  $x_1(t)$  和  $x_2(t)$ , 反应机制为



(输出)。

其中第一个反应表示  $A_1$  有资源来源的增长反应, 第二个反应是  $A_2$  的自催化反应, 第三个反应是  $A_2$  的输出。因此这个反应系统是开系统, 按照基本建模法则, 此反应的数学模型为

$$\begin{aligned} dx_1/dt &= K_1x_1 - K_2x_1x_2, \\ dx_2/dt &= -K_3x_2 + K_2x_1x_2, \end{aligned} \quad (1-11)$$

容易知道反应系统(1-11)有两个平衡点,  $(0, 0)$  和  $(x_1^*, x_2^*)$ , 其中  $x_1^* = K_3/K_2$ ,  $x_2^* = K_1/K_2$ 。系统(1-11)在相平面  $(x_1, x_2)$  上有通积分

$$x_1 - x_1^* - x_1^* \ln \frac{x_1}{x_1^*} + x_2 - x_2^* - x_2^* \ln \frac{x_2}{x_2^*} = C, \quad (1-12)$$

在正象限内, 对于任意正常数  $C$  代表一族围绕平衡点  $(x_1^*, x_2^*)$  的闭轨线, 当初始条件确定后,  $C$  的值唯一确定, (1-12)代表这一族闭轨线中的某一条围绕  $(x_1^*, x_2^*)$  的闭曲线, 这说明对于任意初始浓度这个反应将是周期的, 称为保守振荡。

我们看到, 在例 1.1 中出现的是一种稳态结构, 所有解趋于一稳态平衡点, 而在例 1.2 中出现的是周期结构, 在相平面正象限被一族闭轨线所充满, 任何点出发的解都是周期的, 自然人们会提出是否有可能出现极限环结构的两分子正比反应速度的反应机制, 我们有如下定理<sup>[5]</sup>。

**定理 1.1** 如果各反应阶段只是单分子反应和双分子反应, 在包含两个可变中间产物的反应系统中, 不可能存在极限环。

**证明** 令  $\{A\}$  表示初始和最后“物质库”中的化合物,  $x$  和  $y$  为两种中间产物, 系统被认为是等温, 并且没有对流运动, 以  $x(t)$ 、 $y(t)$  代表其本身在时刻  $t$  的浓度, 反应数学模型记为

$$dx/dt = f_x(x, y), \quad dy/dt = f_y(x, y). \quad (1-13)$$

平衡态  $(x^*, y^*)$  为

$$f_x(x^*, y^*) = f_y(x^*, y^*) = 0.$$

(1-13)在  $(x^*, y^*)$  的线性化系统写为

$$dx/dt = a_{11}x + a_{12}y, \quad dy/dt = a_{21}x + a_{22}y.$$

决定  $(x^*, y^*)$  的稳定性的特征方程是

$$\lambda^2 - T\lambda + \Delta = 0,$$

其中

$$T = \left( \frac{\partial f_x}{\partial x} \right)_{(x^*, y^*)} + \left( \frac{\partial f_y}{\partial y} \right)_{(x^*, y^*)}, \quad \Delta = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}.$$

表 1.1

反应阶段	对 $dx/dt$ 的作用 (若 $\neq 0$ )	对 $dy/dt$ 的作用 (若 $\neq 0$ )
$A \rightarrow$	$\hat{x} > 0$	$\hat{y} > 0$
$X \rightarrow$	$a?$	$a > 0$
$Y \rightarrow$	$b > 0$	$\beta?$
$X + Y \rightarrow$	$c?$	$\gamma?$
$2X \rightarrow$	$d < 0$	$\delta > 0$
$2Y \rightarrow$	$e > 0$	$\varepsilon < 0$

现在假设系统服从质量作用律的动力学(即正比反应速度),认为混合物是理想的,并且考虑只存在单分子反应和双分子反应阶段的情况,我们可以写成

$$\begin{aligned} f_x &= \hat{x} + ax + by + cxy + dx^2 + ey^2, \\ f_y &= \hat{y} + ax + \beta y + \gamma xy + \delta x^2 + \varepsilon y^2, \end{aligned} \quad (1-14)$$

$\hat{x}, \hat{y}$  为与  $x, y$  无关的常数,在平衡态

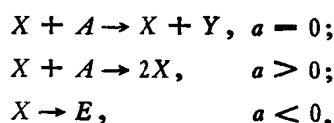
$$\begin{aligned} x^*(a + cy^* + dx^*) &= -(\hat{x} + by^* + ey^{*2}), \\ y^*(\beta + \gamma x^* + \varepsilon y^*) &= -(\hat{y} + ax^* + \delta x^{*2}), \\ T &= a + cy^* + 2dx^* + \beta + \gamma x^* + 2\varepsilon y^* \\ &= -\left[ \frac{\hat{x}}{x^*} + b \frac{y^*}{x^*} + e \frac{y^{*2}}{x^*} - dx^* + \frac{\hat{y}}{y^*} + \alpha \frac{x^*}{y^*} + \delta \frac{x^{*2}}{y^*} - \varepsilon y^* \right]. \end{aligned} \quad (1-15)$$

系统中可能发生的各式各样的反应过程,可以汇集成表 1.1.

我们看到,不论动力学的细节如何,总有

$$\hat{x}, \hat{y}, b, e, \alpha, \delta > 0, \text{ 和 } d, \varepsilon < 0.$$

另一方面,  $a, c, \beta, \gamma$  是正还是负未定,例如对  $a$  来说,我们可以知道反应  $X \rightarrow$ , 可能产生  $X$ ; 也可能消耗  $X$ ; 也可能保持  $X$  不变,如下:



又由  $x^*, y^*$  为正,于是我们可以断言表达式(1-15)不可能变成大于零。

又,我们取 Dulac 函数  $B(x, y) = \frac{1}{xy}$  则

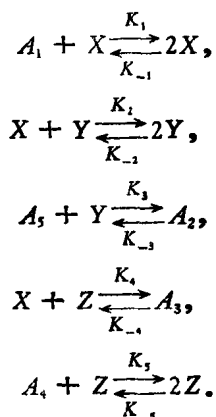
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (B(x, y)f_x(x, y)) + \frac{\partial}{\partial y} (B(x, y)f_y(x, y)) \\ = -\frac{1}{x^2} (by + ey^2 + \hat{y}) - \frac{1}{y^2} (ax + \delta x^2 + \hat{x}) + dx + \varepsilon y < 0. \end{aligned}$$

在整个正象限内恒成立,所以由 Dulac 准则系统(1-13)不可能存在极限环,正平衡点  $(x^*, y^*)$  如果存在则是全局稳定的。

这个定理由文献[4]首先给出完整的证明,另外我们要说明系统(1-13)右端函数为(1-14)的形式,即均为  $x, y$  的二次多项式,这时我们称(1-13)为二次微分系统。如果一个二次微分系统不是代表双分子反应,则一般来说定理 1.1 是不成立的。例如陈兰荪等<sup>[5]</sup>曾证明一个二次微分系统可能出现不少于四个极限环。

还必须说明,定理 1.1 是指只包含两个可变中间产物的双分子反应系统而言,如果可

变中间产物多于两个,即使是恒温情况下的双分子反应系统,不但可能出现极限环<sup>[7]</sup>,而且还可能出现更复杂的结构——混沌(chaos)结构。例如 Willamowski-Rössler 网络,



设  $A_1, \dots, A_5$  的浓度为常数,可变中间产物  $X, Y, Z$  的浓度  $x, y, z$  的数学模型为

$$\begin{aligned}
 dx/dt &= K_1x - K_{-1}x^2 - K_2xy + K_{-2}y^2 - K_4xz + K_{-4}, \\
 dy/dt &= K_2xy - K_{-2}y^2 - K_3y + K_{-3}, \\
 dz/dt &= -K_4xz + K_{-4} + K_5z - K_{-5}z^2.
 \end{aligned} \tag{1-16}$$

文献[6]设参数  $K_1 = 30, K_{-1} = 0.25, K_2 = 1, K_{-2} = 10^{-4}, K_3 = 10, K_{-3} = 10^{-3}, K_4 = 1, K_{-4} = 10^{-3}, K_5 = 16.5, K_{-5} = 0.5$  时对系统(1-16)作了计算,得到混沌解,如图 1.3 所示。

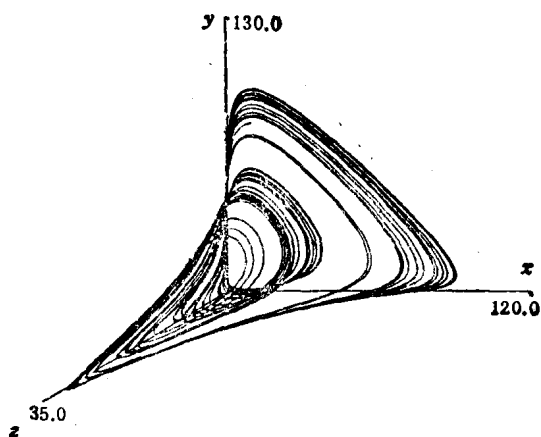


图 1.3

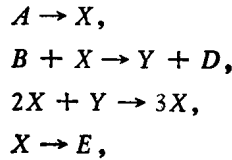
## 2. 三分子反应的数学模型

我们这里仍然是在恒温的条件下考虑三分子正比反应速度的数学模型,但三分子反应模型要比两分子反应模型复杂,无法得出像定理 1.1 那样统一完整的结论,只有分别就

各种各样的反应机制来进行研究,我们就几个主要的反应机制作为例子叙述如下。

**例 1.3 Prigogine 三分子反应模型**

反应机制为:



这里  $D, E$  为生成物。

我们假设所有反应速度常数都是 1 (否则其数学模型也可通过适当的变换化为与此相同的形式), 其中  $A, B$  分别为反应物的浓度,  $x, y$  为中间产物的浓度。我们要研究中间产物的浓度随着反应时间而变化的规律, 首先按上述方法建立相应的数学模型

$$\begin{aligned} dx/dt &= A - (B + 1)x + x^2y, \\ dy/dt &= Bx - x^2y, \end{aligned} \quad (1-17)$$

在这里我们假设化学反应恒温, 且是均匀的, 也就是没有流动扩散的情况。

当  $A \neq 0$  时, 方程(1-17)有唯一正平衡点  $P\left(A, \frac{B}{A}\right)$ 。引入坐标变换

$$\bar{x} = x - A, \quad \bar{y} = y - \frac{B}{A},$$

则系统(1-17)化为(仍以  $x, y$  记  $\bar{x}, \bar{y}$ )

$$\begin{aligned} dx/dt &= (B - 1)x + A^2y + \frac{B}{A}x^2 + 2Axy + x^2y, \\ dy/dt &= -Bx - A^2y - \frac{B}{A}x^2 - 2Axy - x^2y. \end{aligned} \quad (1-18)$$

坐标原点  $O(0,0)$  是(1-18)的唯一平衡点, 容易计算(1-18)在  $(0,0)$  的线性化系统的特征方程是

$$\lambda^2 + (A^2 + 1 - B)\lambda + A^2 = 0.$$

显然  $O(0,0)$  是初等奇点, 且非鞍点, 容易得到如下结论:

- (i) 当  $B < 1 + A^2, B < (1 - A)^2$  时  $O$  为稳定结点;
- (ii) 当  $B > 1 + A^2, B > (1 + A)^2$  时  $O$  为不稳定结点;
- (iii) 当  $(1 - A)^2 < B < 1 + A^2$  时  $O$  为稳定焦点;
- (iv) 当  $(1 + A)^2 > B > 1 + A^2$  时  $O$  为不稳定焦点;
- (v) 当  $B = 1 + A^2$  时  $O$  为中心点;
- (vi) 当  $B = (1 + A)^2$  时  $O$  为不稳定临界结点;
- (vii) 当  $B = (A - 1)^2$  时  $O$  为稳定退化结点。

利用 Poincaré 方法容易判定, 当  $B = 1 + A^2$  时系统(1-17)的平衡点  $P$  是稳定细焦点  $\left(C, -\frac{2 + A^2}{9AB} < 0\right)$ , 这样就完成系统(1-17)的平衡点的分析。我们下面讨论极限环的存在唯一性问题, 把系统(1-18)写成

$$\begin{aligned} dx/dt &= -x - G(x, y), \\ dy/dt &= G(x, y), \end{aligned} \quad (1-19)$$

其中

$$G(x, y) = -(A+x) \left[ \frac{B}{A}x + (A+x)y \right].$$

**定理 1.2** 设  $A > 0, B > 0$ , 则当  $B > 1 + A^2$  时系统 (1-19) 至少有一个极限环。

**证明** 我们考察系统 (1-19) 所确定的方向场: 水平等倾线  $G(x, y) = 0$ , 为直线

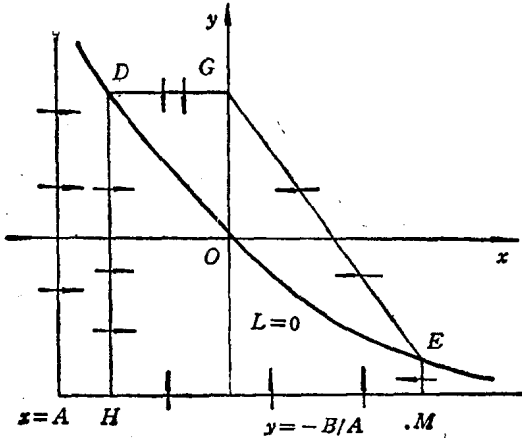


图 1.4

$x = -A$  和曲线  $L = \frac{B}{A}x + (A+x)y = 0$ , 其中曲线  $L = 0$  有两条渐近线  $x = -A$  和  $y = -\frac{B}{A}$ , 如图 1.4 所示. 因为在直线  $y = -\frac{B}{A}$  上有  $dy/dt = (A+x)B > 0$  (当  $x > -A$  时), 再作直线  $x = -\frac{AB}{1+B} > -A$  与  $y = -\frac{B}{A}$  以及  $L = 0$  分别交于  $H$  和  $D$ , 考察线段  $HD$  上的向量场, 在  $HD$  上有

$$dx/dt = \frac{A}{(1+B)^2} (B + Ay) > 0$$

(当  $y > -\frac{B}{A}$  时),

$D$  点的坐标为  $(-\frac{AB}{1+B}, \frac{B^2}{A})$ , 过  $D$  作水平线与  $y$  轴交于一点  $G$ , 显然在线段  $DG$  上有  $L > 0, x + A > 0$ , 所以在  $DG$  上有  $dy/dt < 0$ , 过  $G$  作直线

$$V = y + x = B^2/A,$$

我们有

$$\frac{dV}{dt} \Big|_{V=B^2/A} = dy/dt + dx/dt = -x < 0 \text{ (当 } x > 0 \text{ 时)}.$$

又, 直线  $y + x = B^2/A$  与曲线  $L = 0$  交于另一点  $E$ , 过  $E$  作垂线与  $y = -B/A$  交于一点  $M$ , 显然在  $EM$  线段上有  $dx/dt < 0$ . 因此得到闭曲线  $HDGEMH$  构成一个 Bendixion 外境界线, 在其上系统 (1-19) 所确定的向量场的方向均由外向内. 另一方面在其内有唯一平衡点  $O$ , 在定理的条件下  $O$  是不稳定的, 因此由 Bendixion 定理, 必然至少存在一个稳定的极限环. 定理得证.

**定理 1.3** 设  $A > 0, B > 0$ , 则当  $B > 1 + A^2$  时系统 (1-19) 存在唯一极限环.

**证明** 引进代换  $v = -(x + y)$  则系统 (1-19) 化为:

$$dv/dt = x,$$

$$dx/dt = -(x+A)^2v - \left[ x^3 - \frac{B-2A^2}{A}x^2 + (1+A^2-B)x \right]. \quad (1.20)$$

再引进时间变换



$$dz/dt = \frac{1}{(x+A)^2},$$

则(1-20)化为:

$$dv/dt = \frac{x}{(x+A)^2},$$

$$dx/dt = -v - \left[ x^3 - \frac{B-2A^2}{A}x^2 + (1+A^2-B)x \right] \frac{1}{(x+A)^2}. \quad (1-21)$$

我们应用张芷芬关于极限环的唯一性定理,这里容易验算:

$$g(x) = x/(x+A)^2;$$

$$F(x) = \left[ x^3 - \frac{B-2A^2}{A}x^2 + (1+A^2-B)x \right] \frac{1}{(x+A)^2};$$

$$f(x) \equiv F'(x); f(0) = -A^2(B-1-A^2) < 0;$$

$$xg(x) > 0, \text{ 当 } x > -A, x \neq 0 \text{ 时};$$

当  $x \rightarrow -A+0$  或  $x \rightarrow +\infty$  时  $G(x) \rightarrow +\infty$ , 并且我们有: 当  $x > 0$  时

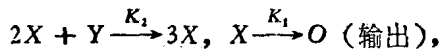
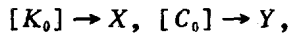
$$\frac{d}{dx} \left( \frac{f(x)}{g(x)} \right) = 1 + \frac{2}{(x+A)^2} + \frac{B-1-A^2}{x^2} > 0.$$

因而满足极限环唯一性定理的所有条件,定理得证.

容易看出系统(1-18)关于参数  $B$  构成广义旋转向量场,因此可知当  $B \leq 1+A^2$  时不存在极限环,与模型有关的研究有文献[8-11].

#### 例 1.4 Tyson-Lighe 三分子模型

与 Prigogine 三分子模型一样, Tyson-Lighe 三分子模型也是一个开系统,只是这里  $X$  和  $Y$  分子的输入均是常速率的,反应机制为



以  $x(t)$  和  $y(t)$  分别代表  $X$  和  $Y$  分子在时刻  $t$  的浓度,我们有数学模型

$$\begin{aligned} dx/dt &= K_0 - K_1x + K_2x^2y, \\ dy/dt &= C_0 - K_2x^2y. \end{aligned} \quad (1-22)$$

作无量纲化代换

$$x = \sqrt{\frac{K_1}{K_2}} \bar{x}, y = \sqrt{\frac{K_1}{K_2}} \bar{y}, t = \frac{1}{K_1} \tau.$$

把变换后的方程中的  $\bar{x}$ ,  $\bar{y}$  和  $\tau$  仍记为  $x$ ,  $y$  和  $t$ . 则(1-22)化为

$$\begin{aligned} dx/dt &= x^2y - x + b, \\ dy/dt &= -x^2y + a, \end{aligned} \quad (1-23)$$

其中

$$b = \frac{K_0\sqrt{K_1}}{K_1\sqrt{K_1}}, a = \frac{C_0\sqrt{K_1}}{K_1\sqrt{K_1}}, (a > 0, b > 0).$$

容易知道系统(1-23)有唯一平衡点  $\left( a+b, \frac{a}{(a+b)^2} \right)$ , 记为  $(x^*, y^*)$ , 容易计算得

知,当

$$\frac{a-b}{a+b} - (a+b)^2 > 0 \quad (1-24)$$

时,  $(x^*, y^*)$  为不稳定焦点或结点.

**定理 1.4** 若不等式(1-24)成立, 则方程(1-23)至少存在一个极限环.

**证明** 与定理 1.2 类似, 我们来构造 Bendixson 环域  $ABCD$ . 如图 1.5 所示, 其中

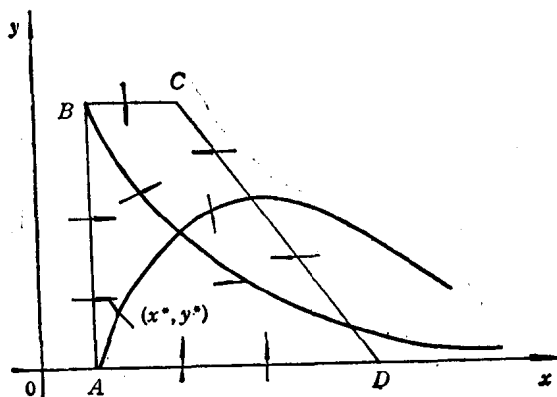


图 1.5

$A(b, 0)$ , 直线  $AB$  垂直于  $x$  轴, 与等倾线  $-x^2y+a=0$  交于  $B\left(b, \frac{a}{b^2}\right)$ ,

作  $BC$  平行于  $x$  轴, 取  $C\left(a+b, \frac{a}{b^2}\right)$ ,

作直线  $l: x+y=a+b+\frac{a}{b^2}$ , 与

$x$  轴交于一点  $D$ , 易知在  $AB$  上有

$dx/dt > 0$ , 在  $BC$  上有  $dy/dt < 0$ ,

在  $AD$  上有  $dy/dt > 0$ , 在直线  $CD$

上有

$$dl/dt|_{CD} = -x + (a+b) < 0$$

$$(x > a+b)$$

因而在曲线  $ABCD$  上系统(1-23)所确定的方向场的方向均为由外向内, 又由于当(1-24)成立, 平衡点  $(x^*, y^*)$  为不稳定, 因此由 Bendixson 定理, 至少存在一个极限环. 定理证毕.

**定理 1.5** 若不等式(1-24)成立, 则系统(1-23)有唯一稳定极限环.

**证明** 首先把坐标原点移至  $(x^*, y^*)$ , 则系统(1-23)化为

$$dx_1/dt = \frac{a-b}{a+b}x_1 + (a+b)^2y_1 + \frac{ax_1^2}{(a+b)^2} - 2(a+b)x_1y_1 + x_1^2y_1,$$

$$dy_1/dt = \frac{-2a}{a+b}x_1 - (a+b)^2y_1 - \frac{ax_1^2}{(a+b)^2} - 2(a+b)x_1y_1 - x_1^2y_1.$$

再作变换  $x = x_1$ ,  $z = x_1 + y_1$ ,  $d\tau = (x_1 + a + b)^2 dt$  则得到

$$dx/d\tau = z - F(x), \quad (1-25)$$

$$dz/d\tau = -g(x), \quad x > -(a+b),$$

其中

$$F(x) = \frac{x+a}{(x+a+b)^2} + x - \frac{a}{(a+b)^2},$$

$$g(x) = \frac{x}{(x+a+b)^2},$$

$$f(x) = F'(x) = 1 - \frac{x+a-b}{(x+a+b)^2}.$$

由定理条件可知

$$f(0) = 1 - \frac{a-b}{(a+b)^2} < 0,$$

$$xg(x) = \frac{x^2}{(x+a+b)^2} > 0, \text{ 当 } x \neq 0 \text{ 时,}$$

$$G(x) = \int_0^x g(x) dx = \ln(x+a+b) + \frac{a+b}{x+a+b}.$$

因此当  $x \rightarrow \infty$  或  $x \rightarrow -(a+b)+0$  时,  $G(x) \rightarrow +\infty$ .

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{f}{g} \right) = \frac{x^2(x+a+b)^2 + [1-(a+b)^2]x^2 + 2[a-b-(a+b)^2]x - (a+b)^4 + a^2 - b^2}{x^2(x+a+b)^2}.$$

上式右端分子的第一项恒正,后面是  $x$  的二次三项式,其判别式为

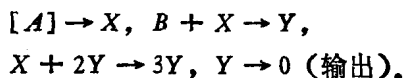
$$-8b[a-b-(a+b)^2] < 0.$$

由于  $\frac{a-b}{a+b} - (a+b)^2 > 0$ , 所以  $a+b < 1$ , 即  $1 - (a+b)^2 > 0$ . 又  $-(a+b)^4 + a^2 - b^2 - (a+b)^2 \left[ \frac{a-b}{a+b} - (a+b)^2 \right] > 0$ , 因此  $\frac{d}{dx} (f/g) > 0$ , 满足张芷芬的极限环唯一性定理的全部条件<sup>[12]</sup>. 定理得证.

于此模型有关的工作有文献[13,14].

### 例 1.5 低浓度三分子模型.

考虑与前两例稍有不同的反应机制:



以  $x, y$  记在时刻  $t$  时  $X, Y$  的浓度,反应数学模型为

$$\begin{aligned} dx/dt &= A - Bx - xy^2, \\ dy/dt &= Bx + xy^2 - y. \end{aligned} \tag{1-26}$$

系统有唯一平衡点  $P \left( \frac{A}{B+A^2}, A \right)$ . 引进变换

$$x = \bar{x} + \frac{A}{B+A^2}, y = \bar{y} + A.$$

把变换后所得的系统中的  $\bar{x}, \bar{y}$  分别仍记为  $x, y$ , 则系统(1-26)化为

$$\begin{aligned} dx/dt &= -(B+A^2)x - \frac{2A^2}{B+A^2}y - 2Axy - \frac{A}{B+A^2}y^2 - xy^2, \\ dy/dt &= (B+A^2)x + \frac{A^2-B}{B+A^2}y + 2Axy + \frac{A}{B+A^2}y^2 + xy^2. \end{aligned} \tag{1-27}$$

易知(1-27)有唯一奇点  $O(0,0)$  是初等奇点,且非鞍点,且有:

- (i) 当  $2A^2/(B+A^2) < B+A^2+1$  时,  $O$  为稳定焦点或结点;
- (ii) 当  $2A^2/(B+A^2) > B+A^2+1$  时,  $O$  为不稳定焦点或结点;
- (iii) 当  $2A^2/(B+A^2) = B+A^2+1$  时,  $O$  为稳定细焦点.

**定理 1.6** 当  $2A^2/(B+A^2) > B+A^2+1$  时,系统(1-26)至少存在一个极限环.

**证明** 构造 Bendixson 区域,其边界(图 1.6)  $L_1 = x - A/B = 0$ , 对于系统(1-26)有

$$dL_1/dt|_{L_1=0} = -\frac{A}{B}y^2 < 0;$$